



M. Haase*, A. Mora, B. Lehle¹, T. Rabbow², P.-J. Plath²

Modellierung des lasergestützten chemischen Jet-Ätz-Verfahrens

Einführung

In diesem Beitrag werden verschiedene Ansätze zur Modellierung eines vor kurzem entwickelten lasergestützten chemischen Jet-Ätz-Verfahrens zur Mikrostrukturierung von Metallen vorgestellt [1] und ein Teil der Ergebnisse aus einem von der VW-Stiftung geförderten interdisziplinären Projekt (AZ: I/77313) zusammengefasst. Die Strukturbildungsphänomene, die beim Laser-Jet-Verfahren auftreten, sind charakteristisch für nichtlineare offene Systeme fern vom thermodynamischen Gleichgewicht. Da für diese Systeme universelle Gesetzmäßigkeiten existieren, lassen sich die vorgestellten Methoden auch auf andere Selbstorganisationsprozesse anwenden.

Der wachsende Bedarf an metallischen Mikrobautteilen führte in den letzten Jahren zur Entwicklung von innovativen Verfahren zur Mikrostrukturierung von Metallen. Ein wichtiges Anwendungsgebiet ist die Herstellung von metallischen Werkzeugeinsätzen für die Mikroabformtechnik, die eine kommerzielle Produktion von Mikrostrukturen und Komponenten der Mikrosystemtechnik zu minimalen Preisen ermöglicht. Großes Zukunftspotential haben insbesondere integrierte optische Mikrosysteme, wie sie in der Telekommunikationstechnik eingesetzt werden, aber auch Präzisionsinstrumente für minimalinvasive Chirurgie und Biotechnik. Das Laser-Jet-Verfahren wurde bereits erfolgreich bei der Herstellung von superelastischen Mikrowerkzeugen eingesetzt und ist ein vielversprechendes berührungsloses, rein chemisches Abtragsverfahren, bei dem weder Materialveränderungen durch Schmelzen noch unliebsame Schlacke erzeugt werden. Je nach Prozessführung treten gleichmäßige Ätzgräben oder periodische Strukturen auf, wie man sie beispielsweise auch bei Schneidvorgängen beobachtet [2]. Diese unerwünschten Rippel können entweder durch äußere periodische Kräfte induziert werden oder sie entstehen infolge von Instabilitäten der beteiligten nichtlinearen Prozesse. Im folgenden werden wir uns auf diese intrinsisch erzeugten periodischen Strukturen konzentrieren.

* Institut für Höchstleistungsrechnen, Universität Stuttgart, Nobelstr.19, 70569 Stuttgart,

1 vFlow Engineering GmbH, Pforzheimerstr. 348, 70499 Stuttgart,

2 Institut für Angewandte und Physikalische Chemie, AG Chemische Synergetik,
Universität Bremen, Bibliothekstr. NW2, 28334 Bremen

Diskretes stochastisches Modell

Beim lasergestützten chemischen Jet-Ätz-Verfahren wird ein fokussierter Laserstrahl senkrecht auf das zu bearbeitende metallische Werkstück gerichtet, das sich in einem Ätzmittelbecken befindet. Die chemische Zelle ist auf einem computergesteuerten xy-Tisch montiert, so dass das Werkstück relativ zum Laser bewegt werden kann. Koaxial zum Laser wird durch eine Düse frisches Ätzmittel zugeführt. Durch die Laserstrahlung erhöht sich die Temperatur der Metallprobe in einem örtlich begrenzten Bereich, wodurch chemische Reaktionen in Gang gesetzt werden und die Metalloberfläche abgetragen wird. Wesentliche Parameter der Versuchseinrichtung sind Laserintensität, Vorschubgeschwindigkeit, Ätzmittelkonzentration und Flussrate des Ätzmittelstrahls. In Abhängigkeit von den Systemparametern können gleichmäßige Gräben oder periodische Strukturen auftreten, siehe Abb.2a.

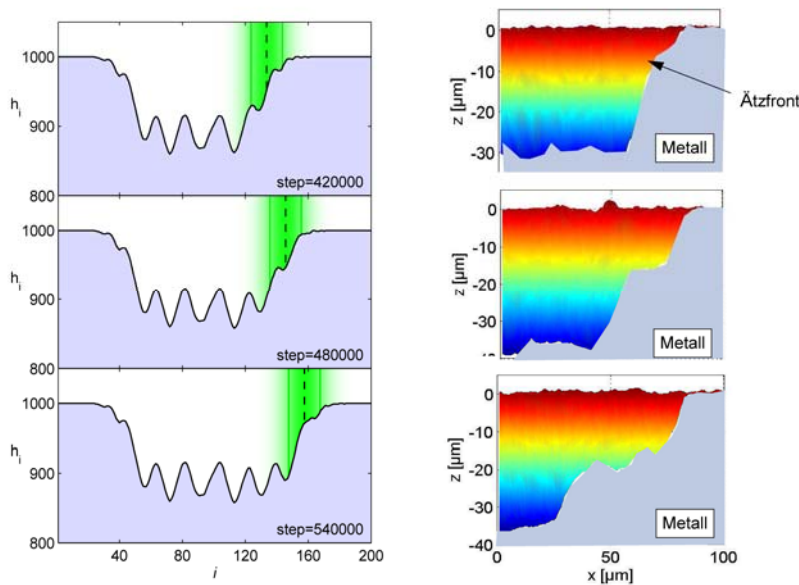


Abb. 1: Drei Momentaufnahmen bei der Ausbildung von Rippelstrukturen: a) Simulation mit diskrettem Modell, b) experimentell erzeugte Strukturen (UBM-Messung)

Um Bereiche von Prozessparametern zu vermeiden, in denen Instabilitäten auftreten, und um die Mikrostrukturierung kontrollieren zu können, ist es notwendig, die nichtlinearen Wechselwirkungen der zugrunde liegenden Prozesse, die zur spontanen Strukturbildung führen, grundlegend zu verstehen und zu modellieren. Da beim laserinduzierten Ätzen Details der miteinander wechselwirkenden thermochemischen und hydrodynamischen Prozesse bisher weitgehend unverstanden waren, wurde zunächst ein phänomenologisches stochastisches diskretes Modell entwickelt, um die wesentlichen Mechanismen, die zur Strukturierung führen, zu studieren und mit geätzten Gräben zu vergleichen. Dem Modell liegen zwei gegenläufige Mechanismen zugrunde, nämlich ein destabilisierender lokaler Oberflächenabtrag durch nass-chemisches Ätzen und ein stabilisierender Vorgang infolge thermischer Oberflächendiffusion [3]. Ursprünglich wurde ein ähnliches diskretes Modell von Cuerno et al. entwickelt, um Musterbildungen beim Ionenbeschuss von amorphen Oberflächen zu simulieren [4].

Das räumlich eindimensionale diskrete Modell ist auf einem Gitter von diskreten Zellen definiert. Details sind in [3] beschrieben. Dabei wurden folgende Modellannahmen getroffen: ein La-

serstrahl mit gaußförmigem Profil erwärmt lokal die Oberfläche, entfernt die Passivierungsschicht und setzt in Abhängigkeit von der Oberflächenkrümmung lokales Ätzen in Gang. Dabei hängt die Absorptionsrate vom Winkel zwischen Laserstrahl und Oberflächenprofil ab. Der Jetstrahl sorgt für die Zufuhr frischer Ätze und beschleunigt den Wärmetransport. Abbildung 1a zeigt drei Momentaufnahmen aus einer Simulation der Evolution der Ätzfront bei der Bildung periodischer Strukturen, die große Ähnlichkeit mit experimentellen Ergebnissen zeigen (Abb. 1b).

Übergang zum Kontinuum: modifizierte Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung

Diskrete Modelle zur Oberflächenstrukturierung kann man in einige wenige Universalitätsklassen einteilen, die das Langzeit-Skalierungsverhalten der Oberflächenprofile charakterisieren [5]. Die Einteilung erfolgt anhand der zugeordneten Kontinuumsgleichungen, die man durch Verfeinerung der diskreten Modelle erhält. Aus den Ätz- und Diffusionsregeln des diskreten stochastischen Modells lässt sich eine Master-Gleichung herleiten, die durch eine Kramers-Moyal-Entwicklung approximiert wird. Vernachlässigt man Terme höherer Ordnung, so kann man eine Fokker-Planck-Gleichung und durch Taylor-Entwicklung die entsprechende Langevin-Gleichung für die Evolution der Oberfläche gewinnen.

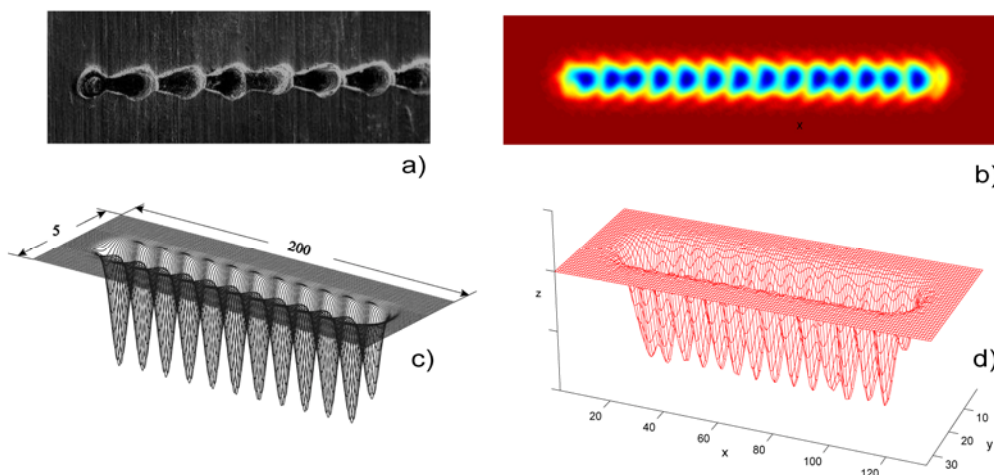


Abb. 2: a) Mikroskopische Aufnahme eines geätzten Grabens, b) diskretes Modell: 2D-Simulation der Oberfläche eines geätzten Grabens, c) Finite-Elemente-Simulation der modifizierten Kuramoto-Sivashinski-Gleichung, d) wie b), 3D Ansicht.

In [6] wird gezeigt, dass dem diskreten Ätzmodell eine modifizierte Kuramoto-Sivashinsky-Gleichung (KS) entspricht. Diese Gleichung ermöglicht eine Analyse des Stabilitätsverhaltens des phänomenologischen Modells und erklärt die Entstehung periodischer Strukturen anhand des Auftretens einer konvektiven Instabilität. Um die Äquivalenz von diskretem und kontinuierlichem Modell zu überprüfen, wurden für den zweidimensionalen Fall Finite Elemente zur numerischen Lösung der KS-Gleichung entwickelt [7] und mit einer 2D-Erweiterung des diskreten Modells verglichen (siehe Abb. 2b-d). Die Simulationsergebnisse zeigen qualitative sehr gute Übereinstimmung, auch der Vergleich mit tatsächlich geätzten Gräben ist zufriedenstellend.

Erweiterung des Kontinuumsmodells

Eine genauere Betrachtung der geätzten periodischen Strukturen zeigt, dass es sich hierbei i. a. nicht um sinusförmige Muster handelt, sondern dass schlüssellochähnliche Vertiefungen auftreten (siehe

Abb. 2a). In Abb. 3 sind die periodischen Oszillationen des elektrochemischen Potentials zusammen mit einer Folge von Momentaufnahmen der Ätzfront aufgetragen [1]. Die Beobachtungen legen nahe, dass Temperatur und Ätzmittelkonzentration geeignete Ordnungsparameter sind, um die Strukturbildung genauer zu beschreiben. Nimmt man an, dass der Metallabtrag normal zur Oberfläche einem Arrheniusgesetz folgt und damit linear von der Ätzmittelkonzentration und exponentiell von der Temperatur abhängt, so kann es zu Relaxationsschwingungen kommen: eine starke Erhöhung der Temperatur führt zu starkem Abtrag, aber auch zu hohem Verbrauch von Ätze und einer Zunahme von Reaktionsprodukten. Dadurch sinkt die Konzentration der Ätze und die chemischen Reaktionen verlangsamen sich, bis durch den Vorschub Temperatur und Konzentration wieder ausgeglichen sind. Das erweiterte System von Evolutionsgleichungen für Temperatur und Konzentration wird in nächster Zeit analysiert. Dabei hoffen wir, hysteretische Vorgänge zu finden, die eine Erklärung der spezifischen Form der periodischen Strukturen erlaubt.

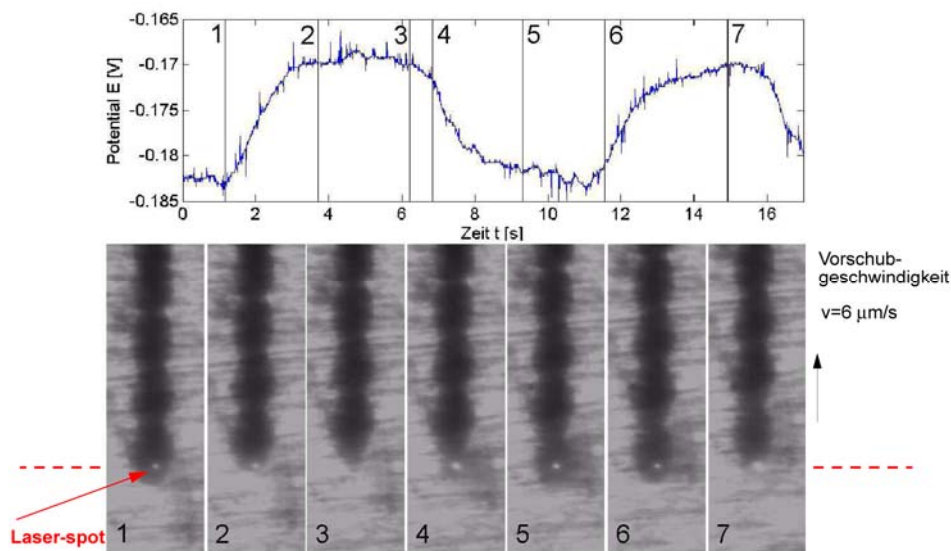


Abb.3: Oben: Elektrochemisches Potential, unten: Momentaufnahmen der Ätzfront

Literatur:

- [1] T.J. Rabbow, A. Mora, M. Haase, P.J. Plath, to be published in *Int. J. Bif. Chaos*.
- [2] R. Friedrich, G. Radons, T. Ditzinger, A. Henning, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4884-4887 (2000).
- [3] A. Mora, M. Haase, T. Rabbow, P.J. Plath, *Phys. Rev. E* **72**, 061604 (2005).
- [4] R. Cuerno, H.A. Makse, S. Tomassone, S.T. Harrington, H.E. Stanley, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4464-4467 (1995).
- [5] A.-L. Barabási, H.E. Stanley: *Fractal Concepts and Surface Growth*, Cambridge Univ. Press (1995).
- [6] A. Mora, T. Rabbow, B. Lehle, P.J. Plath, M. Haase, in: *Fractals in Engineering, New Trends in Theory and Applications*, eds. E. Lutton, J. Lévy Véhel, Springer 125-139 (2005).
- [7] A. Mora, M. Haase, T. Rabbow, P.J. Plath, H. Parisch, in: *Complexus Mundi, Emergent - Patterns in Nature*, ed. M.M. Novak, World Scientific, Singapore 181-190 (2006).