

**Optimierung
des chemisch-mechanischen Polierens
von Siliziumwafern
mittels stochastischer Modelle**

Von der Fakultät für Chemie und Physik
der Technischen Universität Bergakademie Freiberg
genehmigte

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
Dr. rer. nat.

vorgelegt
von Dipl.-Math. Susanne Wiegand
geboren am 22. April 1979 in Marienberg

Gutachter:
Prof. Dr. rer. nat. Hans Joachim Möller, Freiberg
Prof. Dr. rer. nat. habil. Dietrich Stoyan, Freiberg
Dr. rer. nat. Rüdiger Schmolke, Burghausen

Tag der Verleihung: 6. Juli 2007

Danksagung

Nach Abschluss der Arbeiten an meiner Dissertation ist es mir ein Bedürfnis, mich bei meinen beiden Hauptbetreuern sehr herzlich für deren Unterstützung zu bedanken: Prof. Dr. Dietrich Stoyan hat mich mit Ideenreichtum und enormem Erfahrungsschatz maßgeblich in dieser Zeit begleitet. Seine zu jedem Zeitpunkt konstruktive Kritik forderte und förderte mich gleichermaßen. Prof. Dr. Hans Joachim Möller hat mir in der Endphase der Arbeit mit wertvollen fachlichen Hinweisen zur Darstellung und Bewertung der physikalischen Ergebnisse geholfen.

Weiterhin bedanke ich mich bei Frau Dr. Claudia Funke und allen anderen Mitarbeitern des Institutes für experimentelle Physik wie auch den Mitarbeitern des Institutes für Stochastik, die bei theoretischen und insbesondere auch experimentellen Fragen immer diskussions- und hilfsbereit waren.

Bedanken möchte ich mich auch bei Prof. Dr. Martin Schlather von der Georg-August-Universität Göttingen, der mir im theoretischen Teil der Arbeit wertvolle Hinweise gegeben hat.

Der Olympus Deutschland GmbH und speziell Frau Dr. Janovsky gilt mein Dank für die großzügige Bereitstellung von Messtechnik für den experimentellen Teil der Arbeit.

Das vorhandene, aus jahrelangen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten gewonnene Wissen zu den hier betrachteten Prozessen wurde mir von meinen Kollegen in der Siltronic AG stets bereitwillig weitergegeben und hat mir in hohem Maße beim Verstehen derselben geholfen. Stellvertretend für alle Beteiligte, bei denen ich mich an dieser Stelle bedanke, möchte ich Herrn Robert Rurländer und Herrn Dr. Rüdiger Schmolke nennen.

Prof. Dr. Horst Gerhardt und Prof. Dr.-Ing. Klaus Hein danke ich für ihre wichtigen Ratschläge. Herrn Wolfgang John sei gedankt für das Korrekturlesen meiner Manuskripte.

Abschließend gilt ein besonderer Dank meinem lieben Mann, der in den letzten Jahren auf viel Freizeit mit mir verzichten musste und der mir den Rücken dennoch stets gestärkt und vor allem auch frei gehalten hat. Dank gilt auch meinen Eltern, die mir diesen Bildungsweg ermöglicht haben.

Freiberg, den 4. Mai 2007

Susanne Wiegand

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Mathematische Grundlagen	3
2.1	Zufällige abgeschlossene Mengen	3
2.1.1	Definition, Eigenschaften und Parameter	3
2.1.2	Das Boolesche Modell	6
2.1.3	Der Geradenprozess	8
2.1.3.1	Parameterdarstellung von Geraden in der Ebene	9
2.1.3.2	Definition, Stationarität, Isotropie und Intensitätsmaß des Geradenprozesses	11
2.1.3.3	Momentenmaße des Geradenprozesses	15
2.1.3.4	Der markierte Geradenprozess	17
2.1.3.5	Der Poisson-Geradenprozess	18
2.1.4	Der Poisson-Streifenprozess	21
2.1.4.1	Definition	22
2.1.4.2	Flächenanteil	24
2.1.4.3	Sphärische Kontaktverteilungsfunktion	24
2.1.4.4	Lineare Kontaktverteilungsfunktion	25
2.1.4.5	Kovarianz	26
2.2	Aus Punktprozessen konstruierte Zufallsfelder	32
2.2.1	Die Boolesche Funktion	32
2.2.1.1	Definition	33
2.2.1.2	Eindimensionale Verteilungsfunktion	34
2.2.2	Der Shot-Noise-Prozess	34
2.2.2.1	Definition	35
2.2.2.2	Kenngrößen	35
2.3	Aus Geradenprozessen konstruierte Zufallsfelder	36

2.3.1	Das Geraden-Shot-Noise-Feld	36
2.3.1.1	Definition	37
2.3.1.2	Erstes Moment bzw. Erwartungswert	39
2.3.1.3	Zweites Moment und Kovarianz	42
2.3.1.4	Poissonsches Geraden-Shot-Noise-Feld	44
2.3.2	Das Geraden-Maximum-Feld	49
2.3.2.1	Definition	50
2.3.2.2	Eindimensionale Verteilungsfunktion, Erwartungswert und Varianz	52
2.3.2.3	Weitere Formeln	53
2.4	Kombinationen aus zufälliger abgeschlossener Menge und aus Punktprozessen konstruierter Zufallsfelder	55
2.4.1	Zufällige abgeschlossene Menge und Boolesche Funktion	56
2.4.1.1	Definition	56
2.4.1.2	Eindimensionale Dichtefunktion	57
2.4.2	Das Additive Boolesche Modell — Boolesches Modell und Shot-Noise-Prozess	60
2.4.2.1	Definition	60
2.4.2.2	Kenngrößen	61
3	Der Prozess des chemisch-mechanischen Polierens von Wafern	63
3.1	Beschreibung des chemisch-mechanischen Polierprozesses	64
3.1.1	Der Prozess	64
3.1.2	Das Konditionieren der Tuchoberfläche	64
3.1.3	Einflussparameter	65
3.1.4	Bereits existierende Modelle	65
3.1.5	Offene Grundprobleme und Motivation dieser Arbeit	68
3.2	Poliertücher und ihre Oberfläche	70
3.2.1	Stochastische Modelle	71
3.2.1.1	Beschreibung des Poliertuches mithilfe zufälliger abgeschlossener Mengen	71
3.2.1.2	Beschreibung des Konditionierprozesses mithilfe der Booleschen Funktion	72
3.2.1.3	Beschreibung der konditionierten Poliertuchoberfläche mithilfe der Kombination aus Booleschem Modell und Boolescher Funktion	77
3.2.2	Experimentelle Verifizierung der stochastischen Modelle	80

3.2.2.1	Verifizierung des Modells für das Poliertuch mittels REM	80
3.2.2.2	Verifizierung des Modells für die konditionierte Poliertuchoberfläche — Tastverfahren versus optisches Verfahren	82
3.2.2.3	Beziehung zwischen Porosität und anderen physikalischen Parametern	85
3.2.2.4	Tücher mit unterschiedlichen Polierqualitäten	87
3.2.3	Schlussfolgerungen	103
3.2.3.1	Beziehungen zwischen Konditionierparametern/Tuchstruktur und Tuchrauheit	103
3.2.3.2	Kriterien für eine ideale Poliertuchoberfläche	104
3.2.3.3	Konstruktion, Herstellung und Erhaltung einer idealen Poliertuchoberfläche	108
3.2.3.4	Kontaktfläche als Komplement des Booleschen Modells .	109
3.3	Abtragsprozess und resultierende Waferoberfläche	111
3.3.1	Modelle für den Abtragsprozess	111
3.3.1.1	Grundlegende Annahmen	111
3.3.1.2	Beschreibung des Abtragsprozesses mittels eines Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeldes	112
3.3.1.3	Beschreibung des Abtragsprozesses mittels eines Geraden-Maximum-Feldes	135
3.3.1.4	Beschreibung des Abtrags mittels eines Additiven Booleschen Modells	138
3.3.1.5	Vergleich der Modelle	142
3.3.2	Experimentelle Verifizierung der stochastischen Modelle	143
3.3.2.1	Slurry-Partikel	143
3.3.2.2	Experimentelle Ergebnisse aus der Literatur	144
3.3.2.3	Ausgewählte Messverfahren zur Charakterisierung der Ebenheit der Waferoberfläche	147
3.3.2.4	Ebenheit unterschiedlicher Wafer	148
3.3.3	Schlussfolgerungen	151
3.3.3.1	Wahl eines geeigneten Modells anhand der experimentellen Ergebnisse	151
3.3.3.2	Zusammenhang zwischen Tuchrauheit und Unebenheit der Waferoberfläche	152
3.3.3.3	Wechselwirkung zwischen CMP-Einflussparametern und Unebenheit der Waferoberfläche	154
3.3.3.4	Ansätze für weitere Optimierungen des Abtragsprozesses	155

4 Zusammenfassung	157
5 Weitere Forschungsansätze	159

Anhang A

Anhang B

Abkürzungsverzeichnis

Symbolverzeichnis

Tabellenverzeichnis

Abbildungsverzeichnis

Literaturverzeichnis

1 Einleitung

Die Technologie der Waferherstellung in der Halbleiterindustrie ist ein sehr komplexes Thema mit vielen verschiedenen Prozessen. Angefangen beim Ziehen des Einkristalls über Sägen, Schleifen, Läppen, Ätzen bis hin zum Polieren und Reinigen der Wafer werden sowohl mechanische als auch chemische Prozesse eingesetzt. Steigende Anforderungen an die Ebenheit und Reinheit der Waferoberfläche machen es unumgänglich, die bei der Produktion ablaufenden Vorgänge immer besser zu begreifen. Nur so kann letztlich weiteres Optimierungspotenzial gehoben werden. Dabei spielen theoretische Modelle eine entscheidende Rolle, mit denen — nach entsprechender Anpassung und Überführung auf den jeweiligen Prozess — Vorhersagen für konkrete technologische Parameter getroffen werden können.

Im Rahmen dieser Dissertation wird einer der Prozesse bei der Waferherstellung näher thematisiert: das chemisch-mechanische Polieren — kurz CMP genannt. Dieser Prozess ist allgemein in der Halbleiterindustrie (auch bei Chipherstellern) als Planarisierungsverfahren sehr weit verbreitet und hat sich insbesondere zum Erreichen einer maximalen Ebenheit der Waferoberfläche im Nanometerbereich durchgesetzt. Die Ebenheit der Oberfläche ist erforderlich, da im Produktionsprozess von integrierten Schaltkreisen mittels Lithografie ein Muster auf der Waferoberfläche aufgebracht wird: Dieses Muster könnte nicht exakt auf der Waferoberfläche reproduziert werden, wenn der Wafer zu große Topografieschwankungen aufweist.

Das Polieren rauer Oberflächen findet auch in anderen Industriezweigen Anwendung. In umfangreicher Literatur zu diesem Thema werden insgesamt sehr unterschiedliche Theorien über raue Oberflächen und deren Politur, z. B. Thomas (1999), Samuels (2003) oder Steigerwald u. a. (1997) dargestellt.

Wie die Bezeichnung des CMP-Prozesses bereits vorwegnimmt, werden hier chemische und mechanische Komponenten kombiniert eingesetzt: Ein rotierender Wafer drückt

gegen ein rotierendes Poliertuch, wobei gleichzeitig eine chemisch reaktive Flüssigkeit mit Partikeln (Slurry genannt) eingesprüht wird.

Für die weitere Optimierung dieses Prozesses sollen im Rahmen dieser Arbeit grundlegende Erkenntnisse zu einzelnen Einflussfaktoren gewonnen werden. Die Forschungen werden hier nicht — wie in der Praxis allgemein üblich — empirisch, sondern auf der Grundlage vorhandener, modifizierter und neuer stochastischer Modelle vorangetrieben.

Ein Hauptschwerpunkt liegt dabei auf der Beschreibung eines wesentlichen Einflussfaktors des CMP-Prozesses: dem Poliertuch. Seine Wirkungsweise ist noch nicht vollständig erforscht bzw. verstanden. Insbesondere sollen im Rahmen dieser Dissertation Zusammenhänge zwischen Konditionierparametern und resultierender Tuchoberfläche aufgezeigt und messbare Kriterien für ideale Poliertücher entwickelt werden. Damit wird letztlich die Grundlage geschaffen, anhand dieser Parameter neue, bessere Poliertücher zu designen.

Des Weiteren soll in dieser Arbeit ein Abtragsmodell entwickelt werden, das den Einfluss der Tuchoberfläche auf die Ebenheit der Waferoberfläche darstellt. In der Praxis wird eine Abhängigkeit zwischen Tuch und Ebenheit der polierten Waferoberfläche beobachtet, die zur Zeit mit keinem Modell erklärbar ist, was wiederum Optimierungen diesbezüglich erheblich erschwert. Mithilfe dieses Modells sollen Zusammenhänge zwischen Ebenheit der Waferoberfläche und Tuchrauheit bzw. anderen Prozessparametern durch eine Theorie begründet werden, um damit ein neues „Tor“ für weitergehende Optimierungsansätze zu öffnen.

Für die Beantwortung der genannten praktischen Fragestellungen ist es zunächst erforderlich, mathematische Theorien, genauer gesagt stochastische Modelle, vorzustellen und weiterführend zu entwickeln (vgl. Kapitel 2). Mit den Modellen wird sodann im Kapitel 3 das Poliertuch und seine Oberfläche (vgl. 3.2) sowie der Abtragsprozess beim CMP (vgl. 3.3) beschrieben. Dabei ist es notwendig, die abstrakten mathematischen Parameter auf reale physikalische Parameter zu überführen. Durch experimentelle Untersuchungen muss das tatsächlich für den CMP-Prozess zutreffende Modell bestimmt und hieraus abgeleitete Aussagen bestätigt werden. Neue aus den Modellen resultierende Optimierungsansätze und Anregungen für weitere Forschungen bilden den Abschluss der Arbeit.

2 Mathematische Grundlagen

In diesem Kapitel werden mathematische Grundlagen vorgestellt bzw. weitergeführt, die später bei der Modellierung des chemisch-mechanischen Polierprozesses in Kapitel 3 benötigt werden. Jedes Modell wird zunächst anschaulich mit Beispielen erläutert, bevor die exakte mathematische Definition gegeben wird. Für bereits gut erforschte Modelle wie die zufälligen abgeschlossenen Mengen oder die aus Punktprozessen konstruierten Zufallsfelder werden wichtige vorhandene Formeln lediglich kurz beschrieben. Für die bisher in der Literatur wenig betrachteten, aus Geradenprozessen konstruierten Zufallsfelder mussten hingegen Formeln für den hier benötigten Spezialfall weiterführend analysiert und an die Erfordernisse angepasst werden. Kombinationen aus den dargestellten stochastischen Modellen führen schließlich zu neuen Modellen. Erstmalig wird dabei in dieser Arbeit die Kombination aus zufälliger abgeschlossener Menge und Boolescher Funktion betrachtet.

2.1 Zufällige abgeschlossene Mengen

2.1.1 Definition, Eigenschaften und Parameter

Zufällige abgeschlossene Mengen dienen als mathematische Modelle für unregelmäßige geometrische Muster und werden häufig bei der Modellierung und Simulation von Materialstrukturen eingesetzt. Unregelmäßige geometrische Muster sind z. B. zufällige Punkte in der Ebene oder im Raum, eine Menge von Kreisflächen mit zufälligen Mittelpunkten und Radien in einer Ebene (siehe Abb. 2.1) oder Zylinder mit zufälligen Mittelpunkten, Radien und Höhen im Raum. Aus konventionellen Gründen wird den zufälligen Mengen noch die Eigenschaft abgeschlossen hinzugefügt, was bedeutet, dass die Ränder der Mengen mit zu ihnen gehören.



Abbildung 2.1: Eine Menge von Kreisflächen mit zufälligen Mittelpunkten und Radien (schwarz) ist beispielsweise eine zufällige abgeschlossene Menge. Speziell wird hier eine Simulation eines Booleschen Modells mit kreisförmigen Mengen gezeigt.

Definition einer zufälligen abgeschlossenen Menge

Zufällige abgeschlossene Mengen sind mathematisch wie folgt definiert (Stoyan u. a., 1995, S. 194): Es sei $\mathbb{F}$ das System aller abgeschlossenen Teilmengen des $\mathbb{R}^d$ und $\mathcal{F}$ bezeichne die kleinste σ -Algebra über $\mathbb{F}$, die alle Mengen $\mathbb{F}_K$ enthält,

$$\mathbb{F}_K = \{F \in \mathbb{F} : F \cap K \neq \emptyset\},$$

wobei K eine beliebige kompakte Menge des $\mathbb{R}^d$ ist. Eine *zufällige abgeschlossene Menge* ist eine Zufallsvariable Ξ mit Werten in $[\mathbb{F}, \mathcal{F}]$. Somit ist Ξ eine $(\mathcal{A}, \mathcal{F})$ -messbare Abbildung eines Wahrscheinlichkeitsraumes $[\Omega, \mathcal{A}, P]$ in $[\mathbb{F}, \mathcal{F}]$.

Die Verteilung $\mathbf{P}$ von Ξ ist gegeben durch

$$\mathbf{P}(G) = P(\Xi \in G) = P(\{\omega \in \Omega : \Xi(\omega) \in G\}), G \in \mathcal{F}.$$

Eigenschaft Homogenität (auch Stationarität genannt)

Eine zufällige abgeschlossene Menge heißt *homogen (stationär)*, wenn Ξ und die verschobene zufällige abgeschlossene Menge $\Xi_{\mathbf{x}} = \Xi + \mathbf{x}$ für jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ die gleiche Verteilung besitzen.

Für Betrachtungen in ausschließlich einem Punkt kann bei einer homogenen zufälligen abgeschlossenen Menge ein beliebiger Punkt des Raumes herangezogen werden. Der Ursprung des Koordinatensystems kann beliebig gewählt werden.

Parameter

Im Folgenden werden zwei wichtige Parameter für die Charakterisierung einer zufälligen

abgeschlossenen Menge Ξ beschrieben: der Volumenanteil V_V und die lineare Kontaktverteilungsfunktion $H_l(r)$, vgl. Wiegand und Stoyan (2006a).

Der Volumenanteil V_V gibt das mittlere Volumen von Ξ im Einheitswürfel $[0, 1]^d$ an. Ist Ξ homogen und o bezeichne den beliebig gewählten Ursprung des Koordinatensystems, dann gilt:

$$V_V = P(o \in \Xi) = P(\mathbf{x} \in \Xi) \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \quad (2.1)$$

wobei $P(\mathbf{x} \in \Xi)$ die Wahrscheinlichkeit ist, dass der Punkt $\mathbf{x}$ zur Menge Ξ gehört.

Der zweite Parameter, die lineare Kontaktverteilungsfunktion $H_l(r)$, kann wie folgt beschrieben werden: Man betrachte zunächst den Ursprung o im $\mathbb{R}^d$. Dann existieren zwei Fälle: o liegt in Ξ oder o gehört nicht zu Ξ . Wenn o nicht zu Ξ gehört, zeichne man eine in o beginnende Linie L . Der erste Kontakt von L mit Ξ geschieht in zufälliger Entfernung (Abb. 2.2). Die Länge des dazugehörigen Liniensegmentes von o bis zum ersten Kontakt mit Ξ ist eine Zufallsvariable, deren Verteilungsfunktion mit H_l bezeichnet wird. L wird Restsehnenlänge genannt.



Abbildung 2.2: Die zufällige abgeschlossene Menge ist grau dargestellt. Wenn o nicht zur Menge Ξ gehört, betrachtet man die vertikale Linie L von o bis zum ersten Kontakt mit Ξ . Die Länge des Liniensegmentes ist eine Zufallsvariable mit der linearen Kontaktverteilungsfunktion H_l .

Die lineare Kontaktverteilungsfunktion H_l einer zufälligen abgeschlossenen Menge ist bei vielen speziellen Modellen (z. B. Boolesches Modell, vgl. 2.1.2) eine Exponentialverteilung (mit positivem, reellem Parameter λ_2):

$$H_l(r) = 1 - \exp(-\lambda_2 r), \quad r \geq 0,$$

wobei r hier die Länge des Liniensegmentes von o bis zum ersten Kontakt mit Ξ bezeichnet. Für nur schwer oder gar nicht explizit berechenbare H_l hat die allgemeine statistische Erfahrung gezeigt, dass die lineare Kontaktverteilungsfunktion einer zufälligen

abgeschlossenen Menge zumindest näherungsweise eine Exponentialverteilung ist. Dies ist äquivalent zu einer Exponentialform der Kovarianz (Stoyan u. a., 1995, S. 205). Diese empirische Erfahrung hat zum Begriff „Menge mit exponentieller Kovarianz“ geführt (vgl. Ohser und Mücklich, 2000, S. 145 und Stoyan u. a., 1995, S. 205).

Schätzung der Parameter

Für die Schätzung der beiden Parameter V_V und λ_2 einer zufälligen abgeschlossenen Menge existieren einfache Methoden. Eine Schätzung für V_V erhält man über stereologische Methoden (siehe Stoyan u. a., 1995, Kapitel 11), die auf der Formel

$$V_V = A_A = L_L = P_P \quad (2.2)$$

mit V_V als Volumenanteil („Volumen der Menge pro Volumeneinheit“), A_A als Flächenanteil, L_L als Linienanteil und P_P als Punktanteil basieren. Gleichung (2.2) bedeutet damit, dass für einen beliebigen ein- oder zweidimensionalen Querschnitt durch eine zufällige abgeschlossene Menge der Anteil der Menge in diesen Schnitten immer gleich bleibt. Formel (2.2) gilt für den homogenen Fall. Beispielsweise lässt sich V_V einer homogenen dreidimensionalen Menge schätzen, indem man die betrachtete Menge mit einer beliebigen Ebene schneidet und für die im Schnitt entstandene Menge den Flächenanteil bestimmt (z. B. mit Bildanalysegeräten). Weiterführende Erläuterungen stereologischer Methoden sind in Abschnitt 3.2 in Ohser und Mücklich (2000) sowie in Kapitel 2 in Baddeley und Jensen (2005) zu finden.

Für die Schätzung von λ_2 werden Methoden der Bildanalyse oder die klassische Linearmethode verwendet. Bei der Linearmethode wird die zufällige Menge mit einer Linie geschnitten. Die Längen der Sehnen außerhalb der zufälligen Menge werden gemessen. Die mittlere Sehnenlänge $\bar{l}$ ergibt einen Schätzwert für λ_2 :

$$\hat{\lambda}_2 = 1/\bar{l}.$$

2.1.2 Das Boolesche Modell

Ein bekanntes Modell für eine zufällige abgeschlossene Menge ist das Boolesche Modell (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 59 ff.). Für eine vereinfachte Vorstellung zum Modell denke man sich beispielsweise rein zufällig in der Ebene verstreute Punkte. Jeder dieser Punkte bildet das Zentrum einer Menge, z. B. einer kreisförmigen Fläche mit zufälligem Radius. Die Vereinigung aller kreisförmigen Flächen mitsamt ihrer Zentrumspunkte ist nun ein

Beispiel für ein Boolesches Modell. Abbildung 2.1 zeigt eine Simulation eines Booleschen Modells mit kreisförmigen Mengen.

Das Boolesche Modell wird aus zwei Elementen konstruiert:

- (1) aus einem stationären Poisson-Prozess $\Phi = \{x_1, x_2, \dots\}$ im $\mathbb{R}^d$ mit Intensität λ ,
- (2) aus einer Sequenz von unabhängigen, identisch verteilten zufälligen kompakten Mengen $\Xi_1, \Xi_2, \dots$ des $\mathbb{R}^d$, die unabhängig vom Poisson-Prozess Φ sind und der folgenden Bedingung genügen:

$$\mathbf{E}(\nu_d(\Xi_0 \oplus K)) < \infty,$$

wobei K eine beliebige kompakte Menge des $\mathbb{R}^d$, ν_d das Lebesgue-Maß, $\mathbf{E}$ der Erwartungswert ist und Ξ_0 eine weitere zufällige kompakte Menge bezeichnet, die die gleiche Verteilung wie die $\{\Xi_i\}$ besitzt und unabhängig von ihnen und Φ ist. Die Minkowski-Addition, symbolisiert durch $\oplus$, ist wie folgt definiert (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 5):

$$\Xi_0 \oplus K = \{\mathbf{x} + \mathbf{y} : \mathbf{x} \in \Xi_0, \mathbf{y} \in K\}.$$

Die Menge

$$\Xi = \bigcup_{\mathbf{x}_i \in \Phi} (\Xi_i + \mathbf{x}_i) = (\Xi_1 + \mathbf{x}_1) \cup (\Xi_2 + \mathbf{x}_2) \cup \dots$$

wird als Boolesches Modell mit typischem Korn Ξ_0 bezeichnet (vgl. Abb. 2.1). Die Punkte des Poisson-Prozesses werden „Keime“ und die Mengen Ξ_i „Körner“ genannt. Das Boolesche Modell ist homogen (stationär) und im Falle einer isotropen Verteilung der Mengen Ξ_i isotrop (= drehungsinvariant).

Der Volumenanteil V_V eines Booleschen Modells lässt sich wie folgt berechnen:

$$V_V = 1 - \exp(-\lambda \mathbf{E}(\nu_d(\Xi_0))). \quad (2.3)$$

Die lineare Kontaktverteilungsfunktion H_l ist im Falle eines Booleschen Modells mit konvexen Körnern eine Exponentialverteilung:

$$H_l(r) = 1 - \exp\left(-\lambda \frac{\overline{W}_1 b_{d-1}}{b_d} r\right) = 1 - \exp(-\lambda_2 r), \quad r \geq 0,$$

wobei λ die Intensität des Poisson-Prozesses, b_d das Volumen der Einheitskugel im $\mathbb{R}^d$ und $\overline{W}_1$ der Mittelwert des ersten Minkowski-Funktional (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 14 ff.) von Ξ_0 ist.

Die abgeschlossene Hülle des Komplementes des Booleschen Modells

Ein weiteres Modell für eine zufällige abgeschlossene Menge ist die abgeschlossene Hülle des Komplementes des Booleschen Modells, z. B. die Menge der weißen Flächen in Abb. 2.1. Der Volumenanteil ist dann

$$V_V = \exp(-\lambda \mathbf{E}(\nu_d(\Xi_0))),$$

wobei λ die Intensität des Poisson-Prozesses und Ξ_0 das typische Korn des Booleschen Modells sind.

Die Berechnung der linearen Kontaktverteilungsfunktion für das Komplement des Booleschen Modells ist sehr schwierig; die zugehörige Gleichung kann nicht in geschlossener Form gelöst werden. Ein exakter analytischer Ausdruck existiert nur für den eindimensionalen Fall (siehe Torquato, 2002, S. 127 und S. 238). Für höhere Dimensionen verweist Torquato (2002, S. 127) auf eine Methodik, die auf das Invertieren einer Laplace-Transformation hinausläuft.

Die allgemeine statistische Erfahrung hat gezeigt, dass die lineare Kontaktverteilungsfunktion häufig exakt oder zumindest näherungsweise eine Exponentialverteilung ist. Es kann also für das Boolesche Modell, die abgeschlossene Hülle des Komplementes des Booleschen Modells und für viele andere zufällige abgeschlossene Mengen geschlussfolgert werden, dass die lineare Kontaktverteilungsfunktion (annähernd) eine Exponentialverteilung ist (siehe auch die Verifizierung anhand empirischer Daten in Kapitel 3).

2.1.3 Der Geradenprozess

Geradenprozesse sind spezielle zufällige abgeschlossene Mengen, die aus Geraden konstruiert sind. Das Modell kann z. B. zur Beschreibung von Teilchenbahns Spuren oder von Systemen von Bruchstörungslinien verwendet werden.

Der Geradenprozess wird u. a. in den Kapiteln 8 und 9 in Stoyan u. a. (1995) thematisiert. Im Rahmen dieser Arbeit seien lediglich wesentliche, in Kapitel 2.1.4 und 2.3 benötigte Begriffe und Kenngrößen beschrieben: Nach der Einführung einer Parameterdarstellung für Geraden wird der ebene Geradenprozess definiert und einige wichtige seiner Eigenschaften beschrieben. Anschließend werden die für die Charakterisierung der Geradenprozesse maßgeblichen Momentenmaße dargestellt. Grundideen des sogenannten „Markierens“ von Geradenprozessen werden kurz erläutert, da sich dadurch

weitere ausgiebige Anwendungsfelder erschließen lassen. Als spezielles Beispiel wird der Poisson-Geradenprozess mit seinen Kenngrößen vorgestellt. Den Abschluss dieses Abschnittes bilden Methoden zur Schätzung einiger genannter Kenngrößen.

2.1.3.1 Parameterdarstellung von Geraden in der Ebene

Im Folgenden werden immer ungerichtete Geraden im $\mathbb{R}^2$ betrachtet (zu gerichteten Geraden vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 244 ff.). Der $\mathbb{R}^2$ wird durch ein rechtwinkliges kartesisches Koordinatensystem mit Ursprung o und Achsen x_1 bzw. x_2 beschrieben.

Eine Gerade l im $\mathbb{R}^2$ wird in der Hesseschen Normalform dargestellt:

$$l = \{(x, y) : x \sin \alpha - y \cos \alpha - p = 0\},$$

wobei $\alpha \in (0, \pi]$ den Winkel der Geraden l mit der x_1 -Achse und $p \in \mathbb{R}$ den Normalenabstand von l zum Ursprung bezeichnet. Jeder Geraden l im $\mathbb{R}^2$ werden also eineindeutig die zwei Parameter α und p zugeordnet. Die Einführung der Parameterdarstellung für eine Gerade l wird in Abb. 2.3 veranschaulicht.

Es sei angemerkt, dass der Winkel α mit Definitionsbereich $(0, \pi]$ gegen den Uhrzeigersinn gemessen wird. Der Parameter p ist vorzeichenbehaftet: p ist positiv, wenn der Ursprung auf der linken Seite von l liegt; p ist negativ, wenn er rechts von l liegt. (Für die Beurteilung, ob der Ursprung links oder rechts der Geraden l liegt, wird l immer in wachsende x_2 -Richtung betrachtet; ist l senkrecht zur x_2 -Achse, wird als Vorzeichen von p das Vorzeichen der x_2 -Koordinate des Schnittpunktes von l mit der x_2 -Achse gewählt.) Der Definitionsbereich von p umfasst den ganzen $\mathbb{R}^1$.

Jeder Geraden l im $\mathbb{R}^2$ entspricht also (eineindeutig) ein Punkt (α, p) im Streifen $(0, \pi] \times \mathbb{R}$, dem sogenannten Parameter- oder Repräsentationsraum $\mathcal{C}$ (vgl. Abb. 2.4). Der Parameterraum $\mathcal{C}$ ist in p -Richtung unendlich, aber in α -Richtung beschränkt. Häufig wird anstelle des Geradenprozesses im $\mathbb{R}^2$ seine Darstellung als Punktprozess im Parameterraum $\mathcal{C} = (0, \pi] \times \mathbb{R}$ genutzt, da dort charakteristische Größen leichter hergeleitet werden können.

Eine Translation $T_{(r, \varphi)}$, die den Koordinatenursprung o in einen Punkt mit den Polarkoordinaten (r, φ) , $r \geq 0$ und $\varphi \in (0, 2\pi]$, überführt, verschiebt im $\mathbb{R}^2$ Geraden $\{l_i\}$ in

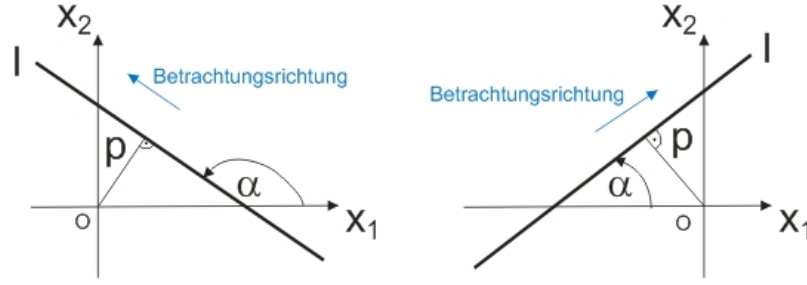


Abbildung 2.3: Jeder Geraden l im $\mathbb{R}^2$ werden eindeutig Parameter α und p zugeordnet (Hessesche Normalform): $\alpha \in (0, \pi]$ ist der Winkel der Geraden l mit der x_1 -Achse der Ebene, $p \in \mathbb{R}^1$ ist der Normalenabstand der Geraden l zum Ursprung. Im linken Beispiel ist p positiv, da der Koordinatenursprung links von l liegt; im rechten Beispiel ist p negativ.

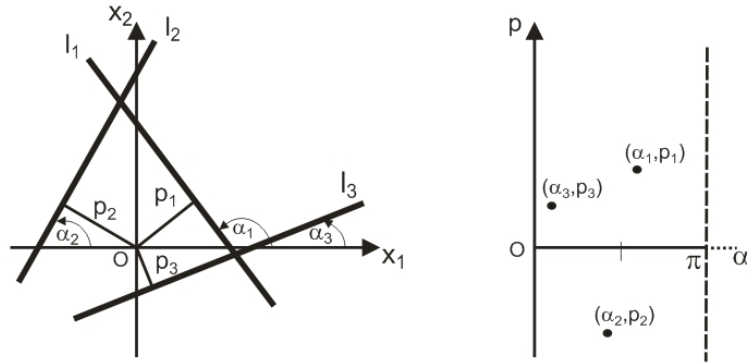


Abbildung 2.4: Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 im $\mathbb{R}^2$ mit Abstand p_i zum Koordinatenursprung und Winkel α_i . Rechts: Die den Geraden l_1, l_2, l_3 entsprechenden Punkte $(\alpha_1, p_1), (\alpha_2, p_2), (\alpha_3, p_3)$ in $\mathcal{C}$.

Geraden $\{l'_i\} = \{T_{(r,\varphi)} l_i\}$. Im Parameterraum $\mathcal{C}$ werden die Punkte $\{(\alpha_i, p_i)\}$ durch die Translation $T_{(r,\varphi)}$ in die Punkte $\{(\alpha'_i, p'_i)\}$ überführt, wobei

$$\alpha'_i = \alpha_i \quad \text{und} \quad p'_i = p_i + r \sin(\alpha_i - \varphi) \quad (2.4)$$

gilt. Translationen sind winkeltreu, d. h. der Winkel α'_i einer verschobenen Geraden l'_i entspricht dem Winkel α_i der Geraden l_i vor der Translation. Der Abstand p'_i , den die verschobene Gerade l'_i zum Nullpunkt hat, ist abhängig vom Abstand p_i und vom Winkel α_i der Ausgangsgeraden l_i . Parallele Geraden, d. h. alle Geraden $\{l_j\}$, deren Winkel $\{\alpha_j\}$ gleich sind, ändern bei einer Translation im $\mathbb{R}^2$ ihren Abstand von $\{p_j\}$ zu $\{p'_j\}$ um denselben Wert. $T_{\mathcal{C}}$ bezeichnet die Transformation in $\mathcal{C}$, die der Translation $T_{(r,\varphi)}$ in $\mathbb{R}^2$ entspricht. $T_{\mathcal{C}}$ ist keine Translation in $\mathcal{C}$. In Abb. 2.5 sind eine Translation $T_{(r,\varphi)}$ im $\mathbb{R}^2$ und ihr Analogon $T_{\mathcal{C}}$ in $\mathcal{C}$ dargestellt.

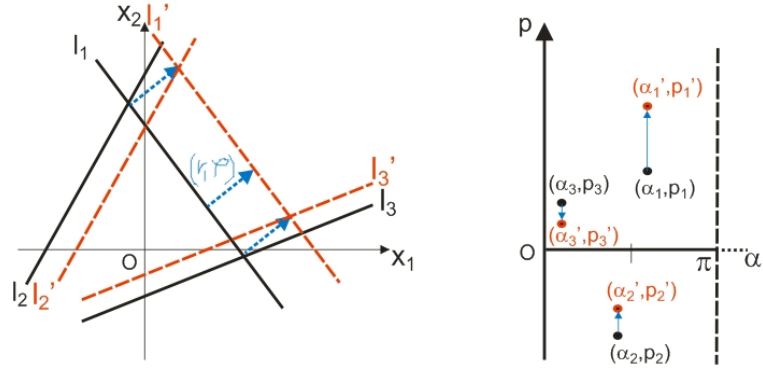


Abbildung 2.5: Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 (schwarz) im $\mathbb{R}^2$. Diese drei Geraden werden um den Vektor $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ mit $r = \|\mathbf{r}\|$ und Winkel φ (blau) verschoben, woraus die roten Geraden l'_1, l'_2, l'_3 resultieren. Rechts: Die entsprechenden Punkte in $\mathcal{C}$. Bei einer Translation $T_{(r, \varphi)}$ von Geraden im $\mathbb{R}^2$ verändern sich die Abstände der Geraden von p_i zu p'_i abhängig vom Abstand p_i und vom Winkel α_i der Ausgangsgeraden l_i , während die α -Koordinate gleich bleibt. Eine Translation $T_{(r, \varphi)}$ im $\mathbb{R}^2$ führt also zu einer (unterschiedlichen) Bewegung der Punkte in $\mathcal{C}$ in p -Richtung ($T_{\mathcal{C}}$).

Eine Rotation R_θ dreht eine Ebene um den Koordinatenursprung o mit dem Winkel $\theta \in (0, 2\pi]$. Sie überführt im $\mathbb{R}^2$ Geraden in Geraden. In $\mathcal{C}$ entspricht der Rotation R_θ eine Überführung der Punkte $\{(\alpha_i, p_i)\}$ in die Punkte $\{(\alpha'_i, p'_i)\}$, wobei

$$\alpha'_i = (\alpha_i + \theta) \bmod \pi \quad \text{und} \quad p'_i = \begin{cases} p_i, & 0 < ((\alpha_i + \theta) \bmod 2\pi) \leq \pi, \\ -p_i, & \pi < ((\alpha_i + \theta) \bmod 2\pi) \leq 2\pi, \end{cases} \quad (2.5)$$

gilt. Bei einer Rotation R_θ verändert sich also der Winkel α_i sowie teilweise das Vorzeichen des Abstands p_i einer Geraden zum Nullpunkt. $R_{\mathcal{C}}$ bezeichnet die Transformation in $\mathcal{C}$, die der Rotation R_θ im $\mathbb{R}^2$ entspricht. $R_{\mathcal{C}}$ ist keine Rotation in $\mathcal{C}$. In Abb. 2.6 sind eine Rotation R_θ im $\mathbb{R}^2$ und ihr Analogon $R_{\mathcal{C}}$ in $\mathcal{C}$ dargestellt.

2.1.3.2 Definition, Stationarität, Isotropie und Intensitätsmaß des Geradenprozesses

Definition

Ein *Geradenprozess* Ψ im $\mathbb{R}^d$ ist eine zufällige Menge $\{l_1, l_2, \dots\}$ von Geraden im $\mathbb{R}^d$, die lokal endlich ist, d. h. nur endlich viele Geraden schneiden jede kompakte Teilmenge des $\mathbb{R}^d$.

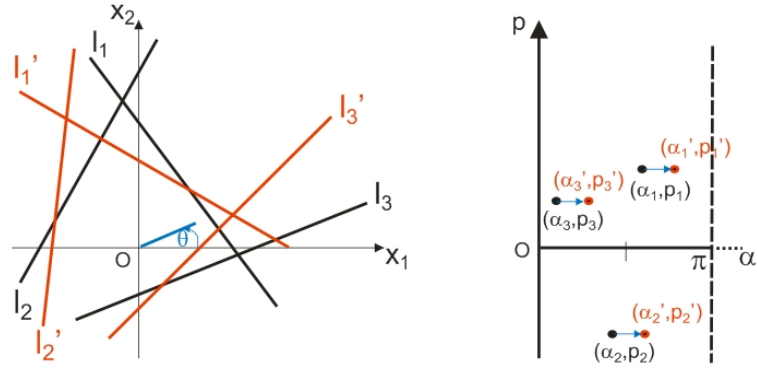


Abbildung 2.6: Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 (schwarz) im $\mathbb{R}^2$. Diese drei Geraden werden um den Koordinatenursprung o mit dem Winkel θ gedreht, woraus die roten Geraden l'_1, l'_2, l'_3 resultieren. Rechts: Die entsprechenden Punkte in $\mathcal{C}$. Bei einer Rotation R_θ von Geraden im $\mathbb{R}^2$ verändert sich der Winkel α_i zu $\alpha'_i = (\alpha_i + \theta) \bmod \pi$, während der Abstand der Geraden teilweise sein Vorzeichen ändert.

Im Folgenden wird nur der Geradenprozess im $\mathbb{R}^2$ betrachtet. Die Aussagen können analog für einen Geradenprozess im $\mathbb{R}^d$ formuliert werden.

Einem Geradenprozess Ψ im $\mathbb{R}^2$ entspricht ein Punktprozess Φ im Parameterraum $\mathcal{C}$ (vgl. Abb. 2.4):

$$\Psi = \{l(\alpha, p) : (\alpha, p) \in \Phi, \alpha \in (0, \pi], p \in \mathbb{R}\}.$$

Dabei wird Φ der *Geraden-Punktprozess* genannt. Der Geraden-Punktprozess ist ein Spezialfall eines Punktprozesses im $\mathbb{R}^2$, nämlich ein Punktprozess, der außerhalb des Streifens $(0, \pi] \times \mathbb{R}$ keine Punkte besitzt. Daher kann die Theorie der Geradenprozesse auch als Sonderfall der Theorie der ebenen Punktprozesse betrachtet werden.

Stationarität und Isotropie

Die Begriffe Stationarität und Isotropie für Geradenprozesse sind analog zu den Begriffen Stationarität und Isotropie für zufällige Mengen definiert (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 196 ff.). Ein Geradenprozess $\Psi = \{l_1, l_2, \dots\}$ heißt *stationär*, wenn $T_{(r, \varphi)}\Psi = \{T_{(r, \varphi)}l_1, T_{(r, \varphi)}l_2, \dots\}$ für jede Translation $T_{(r, \varphi)}$, $r \in [0, \infty)$, $\varphi \in (0, 2\pi]$ (vgl. Abschnitt 2.1.3.1), die gleiche Verteilung wie Ψ besitzt. Ein Geradenprozess Ψ ist genau dann stationär, wenn der $T_{(r, \varphi)}\Psi$ entsprechende Geraden-Punktprozess $T_{\mathcal{C}}\Phi \subseteq \mathcal{C}$,

$$T_{\mathcal{C}}\Phi = \{(\alpha_1, p_1 + r \sin(\alpha_1 - \varphi)), (\alpha_2, p_2 + r \sin(\alpha_2 - \varphi)), \dots\}, \quad (2.6)$$

für jedes $r \geq 0$ und $\varphi \in (0, 2\pi]$ die gleiche Verteilung wie $\Phi = \{(\alpha_1, p_1), (\alpha_2, p_2), \dots\}$

besitzt. Aus der Stationarität eines Geradenprozesses Ψ folgt nicht die Stationarität des zugehörigen Geraden-Punktprozesses Φ im Sinne der Stationarität von Punktprozessen bezogen auf $\mathcal{C}$.

Ein Geradenprozess Ψ heißt *isotrop*, wenn $R_\theta \Psi = \{R_\theta l_1, R_\theta l_2, \dots\}$ für jede Rotation R_θ , $\theta \in (0, 2\pi]$ (vgl. Abschnitt 2.1.3.1), die gleiche Verteilung wie Ψ besitzt. Ein Geradenprozess Ψ ist genau dann isotrop, wenn der $R_\theta \Psi$ entsprechende Geraden-Punktprozess

$$R_\mathcal{C} \Phi = \{(\alpha'_i, p'_i)\} \subseteq \mathcal{C} \quad (2.7)$$

mit α'_i und p'_i gemäß (2.5) für jedes $\theta \in (0, 2\pi]$ die gleiche Verteilung wie $\Phi = \{(\alpha_i, p_i)\}$ besitzt. Aus der Isotropie eines Geradenprozesses Ψ folgt nicht die Isotropie des zugehörigen Geraden-Punktprozesses Φ im Sinne der Isotropie von Punktprozessen bezogen auf $\mathcal{C}$.

Intensitätsmaß, Intensität, Richtungsrose

Punktprozessen werden zufällige Maße zugeordnet (vgl. Stoyan u. a., 1995, Kap. 7), wobei sich Invarianzeigenschaften von Punktprozessen auf die zugeordneten Maße übertragen. Invarianzeigenschaften eines Geradenprozesses führen zu Invarianzeigenschaften des zugehörigen Geraden-Punktprozesses und so auch zu Invarianzeigenschaften des Maßes in $\mathcal{C}$, das dem Geraden-Punktprozess zugeordnet ist.

Zunächst seien drei im Anschluss benötigte Sätze für invariante Maße im Parameterraum $\mathcal{C}$ aufgeführt (Daley und Vere-Jones, 2007):

(i) Sei μ ein lokal endliches und *translationsinvariantes* Maß auf $\mathcal{C}$, d. h. es gilt $\mu(d\alpha dp) = \mu(T_\mathcal{C}(d\alpha dp))$ für alle Transformationen $T_\mathcal{C}$ (vgl. (2.6)). Dann hat μ folgende Form:

$$\mu(d\alpha dp) = \kappa(d\alpha) \nu(dp), \quad (2.8)$$

wobei κ ein endliches Maß auf $[(0, \pi], \mathcal{B}]$, $\mathcal{B}$ Borelsche σ -Algebra, und $\nu = \nu_1$ das Lebesgue-Maß auf dem $\mathbb{R}^1$ ist.

(ii) Sei μ *bewegungsinvariant*, d. h. μ sei translationsinvariant und zusätzlich gelte $\mu(d\alpha dp) = \mu(R_\mathcal{C}(d\alpha dp))$ für alle Transformationen $R_\mathcal{C}$ (vgl. (2.7)). Dann ist κ ein Vielfaches der Gleichverteilung auf $(0, \pi]$: $\kappa(d\alpha) = c \nu(d\alpha)$, $c \geq 0$. Für μ gilt daher:

$$\mu(d\alpha dp) = c \nu(d\alpha) \nu(dp) \quad (2.9)$$

für ein konstantes c mit $0 \leq c < \infty$.

(iii) Sei μ ein bewegungsinvariantes Maß auf $\mathcal{C}$, $K \subseteq \mathbb{R}^2$ eine kompakte, konvexe Menge mit stückweise glattem Rand und $[K] \subseteq \mathcal{C}$ die Menge der Punkte in $\mathcal{C}$, die zu den ungerichteten Geraden gehören, die K schneiden, dann gilt:

$$\mu([K]) = c \cdot U(K) \quad (2.10)$$

mit $U(K)$ als Umfang von K und c als gleichen konstanten Faktor wie in (2.9).

Mittels dieser Sätze werden Formeln für eine wichtige charakteristische Größe eines Geradenprozesses Ψ , das sogenannte Intensitätsmaß Λ , hergeleitet. Das Intensitätsmaß Λ kann als das Analogon zum Mittelwert einer Zufallsgröße gesehen werden. Das Intensitätsmaß Λ eines Geradenprozesses Ψ liefert die mittlere Anzahl von Punkten des zu Ψ gehörenden Geraden-Punktprozesses Φ in Borelmengen B in $\mathcal{C}$:

$$\Lambda(B) = \mathbf{E}\Phi(B) = \mathbf{E} \sharp\{(\alpha, p) \in \Phi \cap B\}. \quad (2.11)$$

Entsprechend dem Kontext wird vom Intensitätsmaß des Geradenprozesses Ψ oder dem Intensitätsmaß des Geraden-Punktprozesses Φ gesprochen. In beiden Fällen ist das gleiche Maß gemeint.

Wenn der Geradenprozess Ψ stationär ist, besitzen der zugehörige Geraden-Punktprozess Φ und die transformierten Geraden-Punktprozesse $\{T_{\mathcal{C}}\Phi\}$ die gleiche Verteilung. Das zugehörige Intensitätsmaß Λ ist demzufolge translationsinvariant. Ist Λ zusätzlich lokal endlich, dann existiert nach Formel (2.8) ein endliches Maß κ auf $(0, \pi]$ mit $\Lambda(d(\alpha, p)) = \kappa(d\alpha) \cdot \nu(dp)$. Die Größe $L_A = \kappa((0, \pi])$, $0 < L_A < \infty$, wird *Liniendichte* oder *Intensität* des stationären Geradenprozesses Ψ genannt. Für die Gesamtlänge L_K aller Strecken, die durch einen Schnitt von Ψ mit einer konvexen, kompakten Menge $K \subseteq \mathbb{R}^2$ entstehen, gilt $\mathbf{E}L_K = L_A \cdot A(K)$, wobei $A(K)$ den Flächeninhalt von K bezeichnet. Damit lässt sich die Liniendichte L_A als mittlere Gesamtlänge der Geradenbruchstücke des Prozesses Ψ deuten, die in einem Gebiet des $\mathbb{R}^2$ vom Flächeninhalt 1 liegen.

Durch Normierung von κ ergibt sich ein Wahrscheinlichkeitsmaß $\mathcal{R} = L_A^{-1} \kappa$ auf $(0, \pi]$, die sogenannte *Richtungsrose* $\mathcal{R}$ des Geradenprozesses Ψ . Die Richtungsrose $\mathcal{R}$ kann als die Verteilung der Richtung einer „typischen“ Geraden von Ψ interpretiert werden. Das Intensitätsmaß Λ eines stationären Geradenprozesses Ψ kann also in der Form:

$$\Lambda(d(\alpha, p)) = L_A \mathcal{R}(d\alpha) \cdot \nu(dp) \quad (2.12)$$

dargestellt werden (vgl. auch Daley und Vere-Jones, 2007).

Wenn Ψ zusätzlich isotrop ist, dann stimmt $\mathcal{R}$ mit der Gleichverteilung auf $(0, \pi]$ überein: $\mathcal{R}(d\alpha) = \frac{1}{\pi} d\alpha$. Die Umkehrung gilt nicht.

2.1.3.3 Momentenmaße des Geradenprozesses

Ähnlich wie die Verteilung von Zufallsgrößen durch Momente beschrieben wird, werden in der Theorie der Punktprozesse Momentenmaße verwendet. Die exakte Definition für das n -te Momentenmaß und ausführliche Erläuterungen zu abgeleiteten Größen sind in Stoyan u. a. (1995), Kap. 4.3, zu finden. Hier werden lediglich für diese Arbeit relevante, auf $\mathcal{C}$ definierte Momentenmaße angegeben.

Das *erste Momentenmaß* $\mu^{(1)}$ eines Geradenprozesses $\Psi \subseteq \mathbb{R}^2$ ist gleich dem Intensitätsmaß Λ von Ψ (vgl. (2.11)). Das *zweite Momentenmaß* $\mu^{(2)}$ eines Geradenprozesses Ψ wird erklärt durch:

$$\begin{aligned} \mu^{(2)}(W \times P \times W' \times P') &= \mathbf{E}(\Phi(W \times P)\Phi(W' \times P')) \\ &= \mathbf{E} \sum_{i,j} \mathbf{1}_W(\alpha_i) \mathbf{1}_P(p_i) \mathbf{1}_{W'}(\alpha_j) \mathbf{1}_{P'}(p_j), \end{aligned} \quad (2.13)$$

wobei $(W \times P), (W' \times P')$ Borelmengen aus $\mathcal{C}$ sind und $\mathbf{1}_X(x)$ die Indikatorfunktion bezeichnet.

Manchmal ist es sinnvoll, in der Summe (2.13) diejenigen Punkte (α_i, p_i) auszuschließen, die in beiden Mengen (hier zwei Produktmengen, allgemein zwei beliebige Borelmengen) vorkommen. Für dieses Maß, das allgemein auf zwei beliebigen Borelmengen definiert ist, wurde in der Literatur der Begriff *zweites faktorielles Momentenmaß* eingeführt. Es ergibt sich aus (2.13) durch Summation über lediglich ungleiche i und j :

$$\alpha^{(2)}(W \times P \times W' \times P') = \mathbf{E} \sum_{i,j}^{\neq} \mathbf{1}_W(\alpha_i) \mathbf{1}_P(p_i) \mathbf{1}_{W'}(\alpha_j) \mathbf{1}_{P'}(p_j). \quad (2.14)$$

Die folgende vereinfachte Schreibweise eines zweiten faktoriellen Momentenmaßes im stationären Fall wird nur für hier benötigte Punktprozesse Υ im $\mathbb{R}^1$ mit Intensität $\lambda = L_A$ angegeben. Es bezeichnet $\alpha_{\Upsilon}^{(2)}$ das zweite faktorielle Momentenmaß des Punktprozesses $\Upsilon = \{p_i\}$, d. h. es gilt analog (2.14)

$$\alpha_{\Upsilon}^{(2)}(P \times P') = \mathbf{E} \sum_{p,p' \in \Upsilon}^{\neq} \mathbf{1}_P(p) \mathbf{1}_{P'}(p')$$

mit $P, P' \subseteq \mathbb{R}$. Im stationären Fall kann $\alpha_{\Upsilon}^{(2)}$ auch wie folgt geschrieben werden (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 126):

$$\alpha_{\Upsilon}^{(2)}(P \times P') = L_A^2 \cdot \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_P(p) \mathbf{1}_{P'}(p+h) \mathcal{K}(dh) dp, \quad (2.15)$$

wobei $\mathcal{K}$ das zweite reduzierte Momentenmaß des stationären Punktprozesses Υ bezeichnet. Die Größe $L_A \mathcal{K}(B)$, B beliebige Borelmenge, ist gleich der mittleren Anzahl von Punkten von Υ in der Menge $B \setminus \{o\}$, unter der Bedingung, dass im Ursprung $\{o\}$ ein Punkt des Punktprozesses liegt.

Im Folgenden wird eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Formel für das zweite faktorielle Momentenmaß eines stationären Geradenprozesses angegeben und bewiesen. Diese Formel wird später in Abschnitt 2.3.1.3 benötigt.

Satz 2.1.1. *Gegeben sei ein stationärer Geradenprozess $\Psi = \{l_i\}$ im $\mathbb{R}^2$ mit endlicher Liniendichte L_A und Richtungsrose $\mathcal{R}$. Die Winkel $\{\alpha_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$ seien untereinander unabhängig und unabhängig von den Abständen $\{p_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$ vom Ursprung. Dann gilt für das zweite faktorielle Momentenmaß des stationären Geradenprozesses Ψ :*

$$\alpha^{(2)}(W \times P \times W' \times P') = L_A^2 \cdot \mathcal{R}(W) \mathcal{R}(W') \cdot \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \mathbf{1}_P(p) \mathbf{1}_{P'}(p+h) \mathcal{K}(dh) dp, \quad (2.16)$$

mit $\mathcal{K}$ als dem zweiten reduzierten Momentenmaß des eindimensionalen stationären Punktprozesses $\{p_i\}$.

Beweis. Ausgehend von dem Geraden-Punktprozess $\Phi = \{(\alpha_i, p_i)\}$ auf $\mathcal{C}$ (der Ψ entspricht) wird die Projektion der Punkte (α_i, p_i) auf die p -Achse betrachtet. Die projizierten Punkte ergeben den im Satz genannten Punktprozess $\Upsilon = \{p_i\}$.

Es gilt (vgl. Daley und Vere-Jones, 2007): Ist der Ausgangsgeradenprozess $\Psi = \{l_i\}$ stationär, so ist auch der Punktprozess $\Upsilon = \{p_i\}$ stationär.

Das Intensitätsmaß von Υ ist

$$\Lambda_{\Upsilon}(dp) = L_A \nu(dp),$$

denn: Es bezeichne Λ das Intensitätsmaß von Ψ . Aufgrund der vorausgesetzten Stationarität von Ψ ist $\Lambda(d(\alpha, p)) = L_A \mathcal{R}(d\alpha) \nu(dp)$, vgl. (2.12). Nun ist $\Lambda_{\Upsilon}(dp) = \Lambda((0, \pi] \times dp) = L_A \mathcal{R}((0, \pi]) \nu(dp)$ und $\mathcal{R}((0, \pi]) = 1$.

Im Folgenden wird nun der Geraden-Punktprozess $\Phi = \{(\alpha_i, p_i)\}$ als markierter Punktprozess interpretiert, wobei die $\{\alpha_i\}$ die Marken aus $\mathbb{M} = (0, \pi]$ sind. Bezeichne $\alpha^{(2)}$ das zweite faktorielle Momentenmaß von Φ (vgl. (2.14)) und $\alpha_{\Upsilon}^{(2)}$ das des unmarkierten Punktprozesses $\Upsilon = \{p_i\}$ (vgl. (2.15)), dann existiert eine Radon-Nikodym-Ableitung $\mathcal{R}_{p,p'}^{(2)}$, die

$$\alpha^{(2)}(P \times W \times P' \times W') = \int_{P \times P'} \mathcal{R}_{p,p'}^{(2)}(W \times W') \alpha_{\Upsilon}^{(2)}(d(p, p'))$$

erfüllt (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 114). Für festes $W \times W'$ ist $\mathcal{R}_{\cdot,\cdot}^{(2)}(W \times W')$ eine nichtnegative messbare Funktion auf $\mathbb{R} \times \mathbb{R}$, während für festgehaltene p und p' die Radon-Nikodym-Ableitung $\mathcal{R}_{p,p'}^{(2)}$ als ein Maß auf dem Raum $\mathbb{M} \times \mathbb{M}$ interpretiert werden kann. Aufgrund der vorausgesetzten Unabhängigkeit der Marken von den Punkten $\{p_i\}$ hängt $\mathcal{R}_{p,p'}^{(2)}$ gar nicht von p, p' ab und man erhält

$$\alpha^{(2)}(P \times W \times P' \times W') = \mathcal{R}^{(2)}(W \times W') \alpha_{\Upsilon}^{(2)}(P \times P').$$

Aufgrund der zusätzlich vorausgesetzten Unabhängigkeit der Marken $\{\alpha_i\}$ untereinander ist $\mathcal{R}^{(2)} = \mathcal{R} \otimes \mathcal{R}$, wobei $\mathcal{R}$ das Wahrscheinlichkeitsmaß auf $(0, \pi]$ — die Richtungsrose — ist. Es gilt dann also: $\alpha^{(2)}(P \times W \times P' \times W') = \mathcal{R}(W) \mathcal{R}(W') \alpha_{\Upsilon}^{(2)}(P \times P')$.

Da der Punktprozess $\Upsilon = \{p_i\}$ stationär ist, ist $\alpha_{\Upsilon}^{(2)}$ nicht von den konkreten Punkten p und p' , sondern lediglich vom Abstand $h = p' - p$ der beiden Punkte abhängig. Daher kann Formel (2.15) angewendet werden, woraus die Behauptung folgt. $\square$

2.1.3.4 Der markierte Geradenprozess

Oft ist es anwendungsbedingt vorteilhaft, jeder Geraden l eine weitere reelle Größe $m_{\Psi}(l)$ zuzuordnen. Beispielsweise kann die Gerade l das Zentrum eines Kratzers beim Polierprozess darstellen; als Marke $m_{\Psi}(l)$ kann dann die Tiefe des Kratzers definiert werden. Die Menge der Paare $\{(l_i, m_i)\}$ mit $m_i = m_{\Psi}(l_i)$ bildet einen sogenannten *markierten Geradenprozess* Ψ_m . Der Definitionsbereich von $m(l)$ wird allgemein *Markenraum* M genannt. Häufig wird die Verteilung $\mathcal{M}_l$ der Marke m der Geraden l angegeben. Im stationären Fall ist $\mathcal{M}_l$ für alle Geraden gleich. Dann wird häufig auch nur kurz $\mathcal{M}$ anstelle von $\mathcal{M}_l$ geschrieben.

Im Parameterraum $\mathcal{C}$ wird dementsprechend einem Punkt (α, p) die weitere Größe $m_{\Phi}(\alpha, p)$ zugeordnet. Die Menge der Punktepaare $\{((\alpha_i, p_i), m_i)\}$ mit $m_i = m_{\Phi}(\alpha_i, p_i)$ bildet einen *markierten Geraden-Punktprozess* Φ_m .

Der markierte Geraden-Punktprozess Φ_m kann auch als Punktprozess im Raum $(0, \pi] \times \mathbb{R} \times M$ aufgefasst werden. Für Mengen $W \subseteq (0, \pi]$, $P \subseteq \mathbb{R}$ und $L \subseteq M$ ist $\Phi_m(W \times P \times L)$ die Anzahl der Punkte des markierten Geraden-Punktprozesses in $W \times P$ mit einer Marke aus L . Das Intensitätsmaß Λ des markierten Geradenprozesses Ψ_m ist gegeben durch

$$\Lambda(W \times P \times L) = \mathbf{E}\Phi_m(W \times P \times L),$$

d. h. $\Lambda(W \times P \times L)$ ist die mittlere Anzahl von Punkten des Geraden-Punktprozesses Φ_m , die eine Marke in L haben. Im stationären Fall vereinfacht sich Λ zu (vgl. Daley und Vere-Jones, 2007 sowie Stoyan u. a., 1995, S. 108):

$$\Lambda(W \times P \times L) = \mu^{(1)}(W \times P \times L) = L_A \mathcal{R}(W) \nu(P) \mathcal{M}(L), \quad (2.17)$$

wobei $\mathcal{M}$ die Verteilung der Marke an einem zufällig ausgewählten Punkt von Ψ_m ist.

Analog zum Intensitätsmaß können auch die weiteren im Abschnitt 2.1.3.3 aufgeführten Maße für markierte Geradenprozesse erklärt werden. Dazu werden hier vereinfacht erwartete Punktzahlen in Produktmengen betrachtet, die um je eine Menge $L, L' \subseteq M$ erweitert wurden (die allgemeine Definition erfolgt analog zum unmarkierten Geradenprozess über beliebige Borelmengen). Beispielsweise ist das zweite Momentenmaß $\mu^{(2)}$ von Ψ_m gegeben durch:

$$\begin{aligned} \mu^{(2)}(W \times P \times L \times W' \times P' \times L') = \\ \mathbf{E} \sum_{i,j} \mathbf{1}_W(\alpha_i) \mathbf{1}_P(p_i) \mathbf{1}_L(m_i) \mathbf{1}_{W'}(\alpha_j) \mathbf{1}_{P'}(p_j) \mathbf{1}_{L'}(m_j) \end{aligned} \quad (2.18)$$

bzw. das zweite faktorielle Momentenmaß $\alpha^{(2)}$ durch:

$$\begin{aligned} \alpha^{(2)}(W \times P \times L \times W' \times P' \times L') = \\ \mathbf{E} \sum_{i,j}^{\neq} \mathbf{1}_W(\alpha_i) \mathbf{1}_P(p_i) \mathbf{1}_L(m_i) \mathbf{1}_{W'}(\alpha_j) \mathbf{1}_{P'}(p_j) \mathbf{1}_{L'}(m_j). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Es wird vorausgesetzt, dass bei Translationen und Rotationen von markierten Geradenprozessen die reellen Marken erhalten bleiben. Für weitergehende Ausführungen zum markierten Punktprozess wird auf Kap. 4.2 in Stoyan u. a. (1995) verwiesen.

2.1.3.5 Der Poisson-Geradenprozess

Ein einfaches Modell für Geradenprozesse ist der Poisson-Geradenprozess. Er bietet elegante Wege und Formeln für die Beschreibung von Strukturen, die auf Geraden basieren.

Ein *Poisson-Geradenprozess* ist ein Geradenprozess, der durch einen Poisson-Punktprozess in $\mathcal{C}$ erzeugt wird (zur Definition des Poisson-Punktprozesses vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 32 ff.). Ein Poisson-Geradenprozess Ψ ist vollständig durch sein Intensitätsmaß Λ definiert. Ein stationärer Poisson-Geradenprozess ist folglich durch seine Liniendichte L_A und die Richtungsrose $\mathcal{R}$ charakterisiert. Der Poisson-Geradenprozess Ψ ist genau dann zusätzlich isotrop, wenn die Richtungsrose die Gleichverteilung auf $(0, \pi]$ ist; zur Charakterisierung des Prozesses genügt dann L_A .

Ist Ψ ein stationärer und isotroper Poisson-Geradenprozess, dann ist die Anzahl der Geraden von Ψ , die einen konvexen Körper K schneiden, Poisson-verteilt mit dem Parameter (= Erwartungswert)

$$\lambda_K = \frac{L_A}{\pi} \cdot U(K), \quad (2.20)$$

wobei $U(K)$ der Umfang von K ist. Diese Poisson-Verteilung kann wie folgt erklärt werden: Die Anzahl der Geraden von Ψ , die einen konvexen Körper K schneiden, entspricht genau der Anzahl der Punkte des entsprechenden Geraden-Punktprozesses Φ in einer bestimmten Teilmenge von $\mathcal{C}$. Da der Poisson-Geradenprozess durch einen Poisson-Punktprozess in $\mathcal{C}$ erzeugt wurde, ist die Anzahl der Punkte von Φ in der Teilmenge von $\mathcal{C}$ Poisson-verteilt mit Parameter λ_K . Es gilt: $\lambda_K = \mu([K])$ und gemäß Formel (2.10) ist $\mu([K]) = c \cdot U(K)$. Die Konstante c ist ebenfalls gemäß (2.10) durch das Intensitätsmaß des isotropen Poisson-Geradenprozesses gegeben, für das $\Lambda(d(\alpha, p)) = \frac{L_A}{\pi} \cdot d\alpha \cdot \nu(dp) = c \cdot d\alpha \cdot \nu(dp)$ gilt.

Eine Simulation eines Poisson-Geradenprozesses ist in Abb. 2.7 zu sehen.

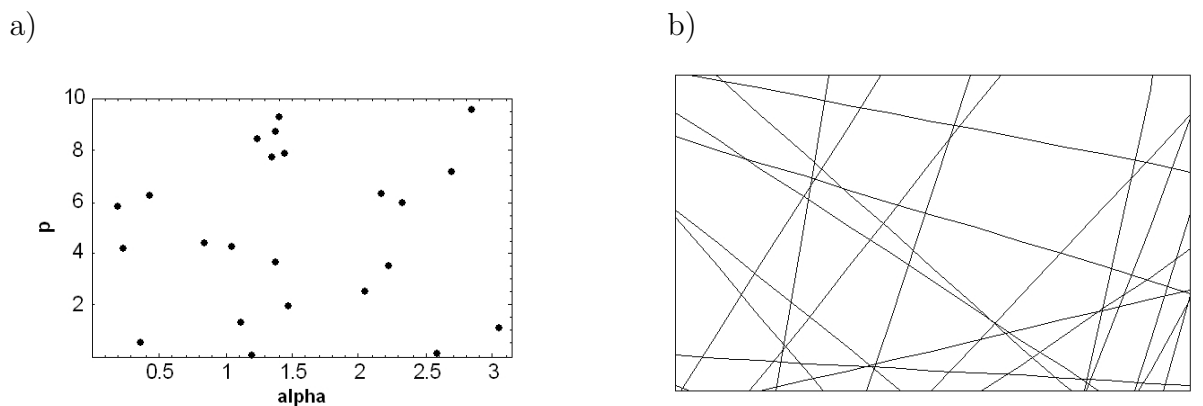


Abbildung 2.7: Simulation eines Poisson-Geradenprozesses: a) Poisson-Punktprozess in $\mathcal{C}$, b) Darstellung der entsprechenden Geraden im $\mathbb{R}^2$.

Neben der Liniendichte L_A ist die sphärische Kontaktverteilungsfunktion $H_s(r)$ eine weitere charakteristische Kenngröße des Poisson-Geradenprozesses. Sie beschreibt den

kürzesten Abstand eines beliebigen Punktes außerhalb von Ψ zur nächsten Geraden von Ψ . Es sei Ψ ein stationärer und isotroper Poisson-Geradenprozess mit Liniendichte L_A . Die Verteilung $H_s(r)$ ist dann wie folgt definiert:

$$H_s(r) = 1 - P(\Psi \cap b(o, r) = \emptyset),$$

wobei $b(o, r)$ einen Kreis mit Radius $r \geq 0$ bezeichnet.

Nun ist die Anzahl der Geraden von Ψ , die einen konvexen Körper K schneiden, Poisson-verteilt mit dem Parameter λ_K . Daher ist

$$P(\Psi \cap b(o, r) = \emptyset) = P(\Psi(b(o, r)) = 0) = \exp(-\lambda_K).$$

Mit Formel (2.20) erhält man für $\lambda_K = \frac{L_A}{\pi} \cdot U(K) = \frac{L_A}{\pi} \cdot 2\pi r$ und somit

$$H_s(r) = 1 - \exp(-2L_A r). \quad (2.21)$$

Der projizierte Punktprozess

In Abschnitt 2.1.3.3 wurde der projizierte Punktprozess $\Upsilon = \{p_i\}$ eines stationären Geradenprozesses $\Phi = \{\alpha_i, p_i\}$ eingeführt. Offensichtlich gilt: Wenn Ψ ein stationärer Poisson-Geradenprozess mit Liniendichte L_A ist, so ist der projizierte Prozess $\Upsilon = \{p_i\}$ ein homogener Poisson-Punktprozess der Intensität L_A . Das zweite reduzierte Momentenmaß vereinfacht sich für einen stationären Poisson-Punktprozess zu:

$$\mathcal{K}(dh) = \nu(dh) = dh.$$

Schnitte eines Poisson-Geradenprozesses

Es sei $\Psi = \{l_1, l_2, \dots\}$ ein stationärer Poisson-Geradenprozess mit Intensität L_A und Richtungsrose $\mathcal{R}$. Es sei weiterhin eine Gerade l_0 mit den Parametern (α_0, p_0) gegeben. Es wird der Punktprozess $\Psi \cap l_0$ betrachtet, der beim Schnitt von Ψ mit der Geraden l_0 entsteht. Der Schnittpunktprozess $\Psi \cap l_0$ ist ein Poisson-Punktprozess und stationär auf l_0 (Stoyan und Mecke, 1983, S. 97). Mit $P_L(\alpha_0)$ wird die Intensität dieses Poisson-Prozesses bezeichnet. Sie hängt nur von der Richtung α_0 ab und es gilt (Stoyan u. a., 1995, S. 289):

$$P_L(\alpha_0) = L_A \int_{(0, \pi]} |\sin(\alpha - \alpha_0)| \mathcal{R}(d\alpha), \quad 0 < \alpha_0 \leq \pi. \quad (2.22)$$

Aus der Intensität $P_L(\alpha_0)$ des Schnittpunktprozesses zwischen Ψ und $l_0(\alpha_0, p_0)$ können die Intensität L_A und die Richtungsrose $\mathcal{R}$ von Ψ berechnet werden. Im Falle der Isotropie ergibt sich $P_L = \frac{2}{\pi} L_A$.

Es wird nun jedem Punkt x aus $\Psi \cap l_0$ als Marke der Winkel $\gamma \in (0, \pi]$ zugeordnet, den l_0 mit derjenigen Geraden des Prozesses bildet, auf der x liegt. Man erhält einen auf l_0 stationären markierten Poisson-Punktprozess. Für die Markenverteilungsfunktion F_H , d. h. die Verteilung des typischen Schnittwinkels, gilt:

$$F_H(\gamma) = \frac{\int_{(0, \gamma]} |\sin(\alpha - \gamma)| \mathcal{R}(d\alpha)}{\int_{(0, \pi]} |\sin(\alpha - \gamma)| \mathcal{R}(d\alpha)}$$

bzw. bei zusätzlicher Isotropie $F_H(\gamma) = \frac{1}{2}(1 - \cos \gamma)$, $0 < \gamma \leq \pi$.

2.1.4 Der Poisson-Streifenprozess

Der Poisson-Streifenprozess ist eine Vereinigungsmenge von Streifen (Bändern), die rein zufällig in der Ebene angeordnet sind. Er ist ein weiteres spezielles Modell einer zufälligen abgeschlossenen Menge. Bei der Charakterisierung des Poisson-Streifenprozesses findet auch die Theorie der Geradenprozesse (vgl. Kapitel 2.1.3) Anwendung, da ein Streifen wiederum als Vereinigungsmenge von Geraden aufgefasst werden kann.

Der Poisson-Streifenprozess ist ein bisher nicht ausführlich betrachteter Spezialfall der Niveaumenge einer Poisson-Funktion (Serra, 1982). Das Modell der Poisson-Funktion wird in Kapitel 2.3.2 beschrieben. Grob formuliert entspricht der Niveaumenge $\Xi \subset \mathbb{R}^2$ einer Poisson-Funktion $Z_M : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ zum Niveau e_n die Menge aller Punkte (x_1, x_2) , deren Funktionswert $Z_M(x_1, x_2)$ größer oder gleich der fixierten Niveauhöhe e_n ist (exakte Definition vgl. 2.3.2.1).

Zur Charakterisierung der Poisson-Funktion wird die Niveaumenge der mit einer beliebigen kompakten konvexen Menge $K \subset \mathbb{R}^3$ dilatierten Poisson-Funktion betrachtet und eine Formel für die zugehörige Leerwahrscheinlichkeit angegeben (siehe Serra, 1982, S. 471). Eine analoge Formel ist auch in Jeulin und Jeulin (1981) zu finden, wobei dort die Poisson-Funktion mit „Poisson surface“ bezeichnet wird. Die allgemeine Formel von Serra (1982) wurde im Rahmen dieser Arbeit verwendet und modifiziert, um die charakteristischen Kenngrößen Flächenanteil sowie sphärische und lineare Kontaktverteilungsfunktion für den Poisson-Streifenprozess angeben zu können. Für die Berechnung der Kovarianz, einer weiteren wichtigen Kenngröße, war eine neue Herangehensweise erforderlich, da zwei verschiedene Punkte mit Abstand $r > 0$ keine konvexe Menge bilden und so die Formel von Serra (1982) nicht angewendet werden konnte. Im Rahmen dieser Dissertation wurde eine Formel für die Kovarianz hergeleitet.

Der Poisson-Streifenprozess kann auch als eine „Verdickung“ von Geraden im $\mathbb{R}^2$ interpretiert werden. Ein dreidimensionales Modell mit einer ähnlichen Herangehensweise, der „Verdickung“ von Ebenen im $\mathbb{R}^3$, wird in Serra (1982), S. 572 ff., beschrieben. Die Ausführungen in Serra (1982) sind jedoch auf das dreidimensionale Modell beschränkt und nicht ohne Weiteres auf den hier betrachteten zweidimensionalen Fall übertragbar.

2.1.4.1 Definition

Gegeben sei ein isotroper und stationärer Poisson-Geradenprozess $\Psi = \{l_1, l_2, \dots\}$ mit Liniendichte L_A . Weiterhin sei F_R die Verteilungsfunktion für den zufälligen Radius R , $0 < R < \infty$, eines Kreises, dessen Mittelpunkt in o liegt.

Bezeichne l_1 eine Gerade einer Realisierung des Poisson-Geradenprozesses Ψ und $b(o, R_1)$ eine Realisierung eines Kreises mit Radius gemäß F_R . Die geometrischen Objekte Gerade und Kreis werden nun so miteinander kombiniert, dass jeder Punkt der Geraden l_1 Mittelpunkt eines Kreises mit Radius R_1 ist (siehe Abb. 2.8). Oder anders formuliert: die Gerade l_1 von Ψ wird mit dem Kreis $b(o, R_1)$ dilatiert. Für jede weitere Gerade l_i des Geradenprozesses wird eine unabhängige Realisierung des Kreises $b(o, R_i)$ verwendet. Die Vereinigung Ξ_G aller Geraden und der dazugehörigen Kreise heißt *Poisson-Streifenprozess* mit Liniendichte L_A und zufälliger Streifenbreite $2R$:

$$\Xi_G = \bigcup_{l_i \in \Psi} l_i \oplus b(o, R_i),$$

wobei R_i der zufällige Radius des zu l_i gehörenden Kreises ist. Der Poisson-Streifenprozess ist stationär und isotrop.

Jeder Streifen im $\mathbb{R}^2$ kann auch als Menge von Geraden aufgefasst werden. Dabei gibt es in jedem Streifen genau eine Gerade, die zum Poisson-Geradenprozess gehört, die sogenannte Zentrumsgerade l_i . Alle weiteren Geraden eines Streifens sind parallel zu l_i (gleicher Winkel α_i wie l_i); ihr Abstand zum Ursprung variiert gemäß des zufälligen Radius zwischen $p_i - R_i$ und $p_i + R_i$. Einem Streifen $l_i \oplus b(o, R_i)$ im $\mathbb{R}^2$ entspricht also die Punktmenge $\{(\alpha_j, p_j) : \alpha_j = \alpha_i, p_j \in [p_i - R_i, p_i + R_i]\}$ in $\mathcal{C}$, wobei (α_i, p_i) der Zentrumsgeraden l_i entspricht. Ausgedrückt durch die Größen des Parameterraumes $\mathcal{C}$ ergibt sich demnach für einen Poisson-Streifenprozess die Darstellung

$$\Xi_P = \bigcup_{(\alpha_i, p_i) \in \Phi} (\alpha_i, p_i) \oplus (\{o\} \times [-R_i, +R_i]),$$

wobei $\Phi = \{(\alpha_i, p_i)\}$ ein stationärer und isotroper Poisson-Geraden-Punktprozess und Ξ_P die Bezeichnung für den Poisson-Streifenprozess in $\mathcal{C}$ ist (kurz: Dilatation von Φ mit der Strecke $[-R_i, R_i]$ senkrecht zur α -Achse). Als Abgrenzung zum Poisson-Streifenprozess $\Xi_G \subseteq \mathbb{R}^2$ wird $\Xi_P \subseteq \mathcal{C}$ *Poisson-Streckenprozess* genannt. Der Poisson-Streckenprozess ist ebenfalls durch die Liniendichte L_A und die zufällige Streifenbreite $2R$ gegeben.

Wird in der Parameterdarstellung die Menge $(\{o\} \times [-R_i, +R_i])$ als Korn und der Poisson-Prozess Φ als Keim interpretiert, ist Ξ_P ein Boolesches Modell, eingeschränkt auf den Raum $\mathcal{C}$ mit einer Strecke als Korn (Abb. 2.9). Der Poisson-Streckenprozess Ξ_P ist stationär im Zylinder-Sinn, aber nicht isotrop in $\mathcal{C}$ (die Körner = die Strecken sind selbst nicht drehungsinvariant und werden nur in einer bestimmten Richtung in einem Punkt zentriert).

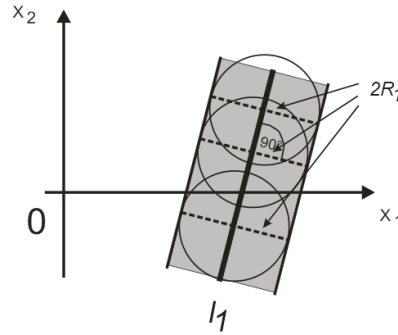


Abbildung 2.8: Veranschaulichung des Konstruktionsprinzips eines Poisson-Streifenprozesses: Als Beispiel wird die Gerade l_1 eines Poisson-Geradenprozesses betrachtet. Jeder Punkt der Geraden l_1 ist Mittelpunkt eines Kreises mit Radius R_1 . Die grau unterlegte Fläche ist ein Streifen, d. h. die Vereinigung der Geraden und der Kreise: $l_1 \oplus b(o, R_1)$.

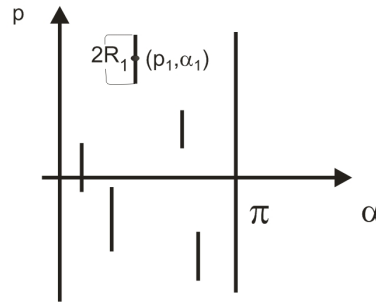


Abbildung 2.9: Der Poisson-Streifenprozess Ξ_G entspricht im Parameterraum $\mathcal{C}$ dem Poisson-Streckenprozess Ξ_P mit parallelen Strecken. Dieser Streckenprozess ist ein Spezialfall des Booleschen Modells (beschränkt auf den Raum $\mathcal{C}$), wobei die Strecken gerade die Körner sind.

2.1.4.2 Flächenanteil

Der Flächenanteil A_A des Poisson-Streifenprozesses Ξ_G entspricht der mittleren Fläche von Ξ_G im Einheitsquadrat.

Satz 2.1.2. *Für den Flächenanteil eines Poisson-Streifenprozesses Ξ_G mit Liniendichte L_A und zufälliger Streifenbreite $2R$ gilt:*

$$A_A = 1 - \exp(-2\bar{R} L_A), \quad (2.23)$$

wobei

$$\bar{R} = \mathbf{E}[R] \quad (2.24)$$

die mittlere halbe Streifenbreite ist.

Beweis. Obige Behauptung folgt aus einer Spezialisierung der Formel in Serra (1982), S. 471, für eine Poisson-Funktion:

$$Q(B, t) = \exp\left(-\int_0^\pi \Theta(d\alpha) [\bar{L}(f'_\alpha \oplus B_\alpha)]\right), \quad (2.25)$$

wobei $Q(B, t)$ die Leerwahrscheinlichkeit, B eine kompakte konvexe Menge des $\mathbb{R}^3$, $t \in \mathbb{R}$ das betrachtete Niveau der Poisson-Funktion, $\Theta(d\alpha)$ die Liniendichte, B_α die senkrechte Projektion der Menge B auf die Gerade mit Richtung α , f'_α die senkrechte Projektion der typischen Funktion f' der Poisson-Funktion auf die Gerade mit Richtung α und $\bar{L}(\cdot)$ die mittlere Länge bezeichnet.

Einsetzen von $\Theta(d\alpha) = \frac{L_A}{\pi} d\alpha$ sowie

$$\bar{L}(f'_\alpha \oplus B_\alpha) = \bar{L}(b(o, R)) \quad \text{für jedes } \alpha \in (0, \pi],$$

wobei $\bar{L}(b(o, R))$ der mittlere Durchmesser des Kreises $b(o, R)$ ist, ergibt

$$A_A = 1 - P(\mathbf{x} \notin \Xi_G) = 1 - \exp(-L_A \bar{L}(b(o, R))).$$

Da $\bar{L}(b(o, R)) = 2\bar{R}$ ist, folgt die Behauptung. $\square$

2.1.4.3 Sphärische Kontaktverteilungsfunktion

Die sphärische Kontaktverteilungsfunktion beschreibt den kürzesten Abstand eines zufälligen Punktes außerhalb von Ξ_G zum nächsten Punkt von Ξ_G in beliebiger Richtung.

Satz 2.1.3. Für die sphärische Kontaktverteilungsfunktion $H_s(r)$ eines Poisson-Streifenprozesses Ξ_G mit Liniendichte L_A gilt:

$$H_s(r) = 1 - \exp(-2L_A \cdot r), \quad r \geq 0. \quad (2.26)$$

Beweis. Die Größe $1 - H_s(r)$ entspricht der Wahrscheinlichkeit des folgenden Ereignisses: Unter der Bedingung, dass der Ursprung nicht zum Poisson-Streifenprozess gehört, gibt es keinen Streifen des Poisson-Streifenprozesses, der den Kreis $b(o, r)$, $r \geq 0$, schneidet:

$$1 - H_s(r) = \frac{P(\Xi_G \cap b(o, r) = \emptyset)}{P(o \notin \Xi_G)}.$$

Anwendung der Formel in Serra (1982), S. 471, vgl. (2.25), mit $\Theta(d\alpha) = \frac{L_A}{\pi} d\alpha$ sowie $\bar{L}(f'_\alpha \oplus B_\alpha) = \bar{L}(b(o, R) \oplus b(o, r)) = \bar{L}(b(o, R + r))$ ergibt:

$$P(\Xi_G \cap b(o, r) = \emptyset) = \exp(-L_A \bar{L}(b(o, R + r))) = \exp(-L_A 2(\bar{R} + r)),$$

wobei $\bar{L}(b(o, R + r))$ den mittleren Durchmesser des Kreises $b(o, R + r)$ bezeichnet. Der Nenner, d. h. die Wahrscheinlichkeit $P(o \notin \Xi_G) = 1 - A_A$, ist durch Formel (2.23) gegeben. Durch triviale Vereinfachungen folgt die Behauptung. $\square$

Die sphärische Kontaktverteilungsfunktion ist unabhängig vom zufälligen Kreisradius R (der halben Streifenbreite). Dies stimmt mit den Erkenntnissen für das sogenannte Poisson-Polygon Π in Matheron (1975), Kap. 6–2., überein. Dort wurde gezeigt, dass $\Pi \ominus b(o, r)$, das mit $b(o, r)$ erodierte Poisson-Polygon, dieselbe Verteilung wie Π hat, unter der Bedingung, dass $\Pi \ominus b(o, r) \neq \emptyset$. Diese Eigenschaft ist unter dem Begriff „bedingte Invarianz“ bekannt.

2.1.4.4 Lineare Kontaktverteilungsfunktion

Der kürzeste Abstand eines beliebigen Punktes außerhalb von Ξ_G zum nächsten Punkt von Ξ_G in einer bestimmten Richtung wird durch die lineare Kontaktverteilungsfunktion charakterisiert.

Satz 2.1.4. Für die lineare Kontaktverteilungsfunktion $H_l(r)$ eines Poisson-Streifenprozesses Ξ_G mit Liniendichte L_A gilt:

$$H_l(r) = 1 - \exp\left(-\frac{L_A}{\pi} \cdot 2r\right), \quad r \geq 0. \quad (2.27)$$

Beweis. Die Größe $1 - H_l(r)$ entspricht der Wahrscheinlichkeit des folgenden Ereignisses: Unter der Bedingung, dass der Ursprung nicht zum Poisson-Streifenprozess gehört, gibt es keine Gerade des Poisson-Streifenprozesses, die die Strecke $s_\beta(o, r)$ im $\mathbb{R}^2$ mit der Länge $r \geq 0$, einem Endpunkt in o und dem Winkel β (mit der x_1 -Achse) schneidet:

$$1 - H_l(r) = \frac{P(\Xi_G \cap s_\beta(o, r) = \emptyset)}{P(o \notin \Xi_G)}.$$

Anwendung der Formel in Serra (1982), S. 471, vgl. (2.25), mit $\Theta(d\alpha) = \frac{L_A}{\pi} d\alpha$ sowie

$$\bar{L}(f'_\alpha \oplus B_\alpha) = \begin{cases} 2\bar{R} + 2r, & \alpha = \beta, \\ 2\bar{R}, & \alpha \neq \beta, \end{cases}$$

ergibt:

$$P(\Xi_G \cap s_\beta(o, r) = \emptyset) = \exp\left(-\frac{L_A}{\pi}(2\bar{R}\pi + 2r)\right).$$

Da der Poisson-Streifenprozess isotrop ist, ist obige Wahrscheinlichkeit unabhängig von β . Der Nenner, d. h. die Wahrscheinlichkeit $P(o \notin \Xi_G) = 1 - A_A$, ist durch Formel (2.23) gegeben. Durch triviale Vereinfachungen folgt die Behauptung. $\square$

Auch die lineare Kontaktverteilungsfunktion ist gemäß der „bedingten Invarianz“ (Matheron, 1975) unabhängig vom Kreisradius R (von der Streifenbreite $2R$).

2.1.4.5 Kovarianz

Wichtige Eigenschaften zweiter Ordnung einer zufälligen abgeschlossenen stationären Menge $\Xi \subseteq \mathbb{R}^d$ werden in der Kovarianz $C(\mathbf{r})$ zusammengefasst. Sie ist für stationäre zufällige Mengen wie folgt definiert (Stoyan u. a., 1995, S. 68):

$$C(\mathbf{r}) = P(o \in \Xi \text{ und } \mathbf{r} \in \Xi) = P(\{0, \mathbf{r}\} \subset \Xi),$$

für $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$. Die Kovarianz $C(\mathbf{r})$ entspricht also der Wahrscheinlichkeit, dass der Nullpunkt und ein Punkt $\mathbf{r}$ zur Menge Ξ gehören. Sie kann auch als Flächenanteil interpretiert werden:

$$C(\mathbf{r}) = P(o \in \Xi, \mathbf{r} \in \Xi) = P(o \in \Xi, o \in \Xi - \mathbf{r}) = P(o \in \Xi \cap \Xi - \mathbf{r}),$$

wobei die Menge $\Xi - \mathbf{r}$ die um den Vektor $-\mathbf{r}$ verschobene Menge Ξ darstellt. Die Menge $\Xi \cap \Xi - \mathbf{r}$ ist ebenfalls eine stationäre zufällige abgeschlossene Menge.

Ist die Menge Ξ nicht nur stationär, sondern auch isotrop, so hängt die Kovarianz $C(\mathbf{r})$ nur vom Abstand r des Punktes $\mathbf{r}$ von o ab. Das Argument der Kovarianz wird dann vereinfacht als reelle Zahl r geschrieben:

$$C(\mathbf{r}) = C(\|\mathbf{r}\|) = C(r).$$

Zur Berechnung der Kovarianz des Poisson-Streifenprozesses konnte nicht die Formel von Serra (1982) angewendet werden, da zwei verschiedene Punkte mit Abstand $r > 0$ keine konvexe Menge bilden. Im Folgenden wird eine im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Formel für die Kovarianz angegeben und über eine neue Herangehensweise bewiesen.

Satz 2.1.5. *Sei Ξ_G ein Poisson-Streifenprozess mit Liniendichte L_A und zufälliger Streifenbreite $2R$. Dann gilt für die Kovarianz von Ξ_G :*

$$C(r) = 2A_A - 1 + (1 - A_A)^2 \exp\left(\frac{L_A}{\pi} \gamma_{\Xi_P}(r)\right), \quad r \geq 0, \quad (2.28)$$

wobei A_A der Flächenanteil von Ξ_G ist und

$$\gamma_{\Xi_P}(r) = \begin{cases} 2\pi\bar{R} - 2r, & 0 \leq r \leq 2\bar{R}, \\ 4\mathbf{E}[R \arcsin(2R/r)] + 2r\mathbf{E}\left[\sqrt{1 - \frac{4R^2}{r^2}}\right] - 2r, & r > 2\bar{R}. \end{cases}$$

Dabei ist $2\bar{R} = \mathbf{E}[2R]$ die mittlere Streifenbreite.

(Es sei angemerkt, dass $\gamma_{\Xi_P}(r)$ als Mengenkovarianz des Poisson-Streckenprozesses $\Xi_P \subseteq \mathcal{C}$ bezeichnet wird. Man beachte, dass die Mengenkovarianz hier nicht im üblichen Sinn definiert ist, sondern die Definition für den Fall des Streckenprozesses angepasst wurde.)

Beweis. Für den Poisson-Streifenprozess ist der Flächenanteil der Schnittmenge $(\Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ gesucht, d. h. die Wahrscheinlichkeit, dass der Nullpunkt in $(\Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ liegt. Zur Berechnung dieser Wahrscheinlichkeit wird im Parameterraum $\mathcal{C}$ gearbeitet. Der Beweis wird in drei Schritten geführt:

- (i) Als erstes wird ein Analogon zu $(o \in \Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ in $\mathcal{C}$ formuliert,
- (ii) als zweites wird die Wahrscheinlichkeit für dieses Analogon in $\mathcal{C}$, $P(((0, \pi] \times \{0\}) \cap (\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P) \neq \emptyset)$, bis zur Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(\mathbf{r})$ vereinfacht,
- (iii) als drittes wird die Mengenkovarianz berechnet.

(i) Analogon zu $(o \in \Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ in $\mathcal{C}$

Die Menge Ξ_G im $\mathbb{R}^2$ entspricht der Menge Ξ_P in $\mathcal{C}$ (vgl. Abschnitt 2.1.4.1). Die Verschiebung von Ξ_G um den Vektor $\mathbf{r}$, gegeben in Polarkoordinaten $\mathbf{r} = (r, \varphi)$, im $\mathbb{R}^2$ bewirkt gemäß dem Abschnitt 2.1.3.1, Gleichung (2.4) die folgende Transformation von Ξ_P in $\mathcal{C}$:

$$T_{\mathcal{C}}\Xi_P = \bigcup_{(\alpha_i, p_i) \in \Phi} (\alpha_i, p_i + r \sin(\alpha_i - \varphi)) \oplus (\{o\} \times [-R_i, +R_i]).$$

Jede Strecke von Ξ_P wird also bei der Transformation mit gegebenem (r, φ) abhängig von α unterschiedlich weit in p -Richtung verschoben, α ändert sich dabei nicht. Die Länge der Strecken ändert sich bei der Verschiebung ebenfalls nicht.

Die Menge der Geraden im $\mathbb{R}^2$, die den Nullpunkt enthalten, entspricht in $\mathcal{C}$ der Punktmenge $K_o = \{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p = 0\}$. Der Nullpunkt ist somit genau dann in der Schnittmenge $(\Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ enthalten, wenn ein Punkt der Menge K_o in $(\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P)$ liegt. Die Menge $\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P$ ist wieder ein Boolesches Modell. Anstelle von $P(o \in \Xi_G \cap \Xi_G - \mathbf{r})$ wird also folgendes Äquivalent in $\mathcal{C}$ berechnet:

$$P(K \cap (\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P) \neq \emptyset) \text{ mit } K = \check{K} = K_o. \quad (2.29)$$

(ii) Vereinfachung des Ausdruckes $P(K \cap (\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P) \neq \emptyset)$, $K = (0, \pi] \times \{0\}$,
bis zur Mengenvarianz

Analog zu den Ausführungen zum Beweis der Formel (3.1.6) in Stoyan u. a. (1995), S. 68, kann die Wahrscheinlichkeit (2.29) wie folgt vereinfacht werden:

$$\begin{aligned} P(K \cap (\Xi_P \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P) \neq \emptyset) \\ &= 1 - (P(K \cap \Xi_P = \emptyset) + P(K \cap T_{\mathcal{C}}\Xi_P = \emptyset) - P(K \cap (\Xi_P \cup T_{\mathcal{C}}\Xi_P) = \emptyset)) \\ &= 2A_A - 1 + P(K \cap (\Xi_P \cup T_{\mathcal{C}}\Xi_P) = \emptyset). \end{aligned}$$

Durch Anwendung der Formel für das Kapazitätsfunktional eines Booleschen Modells (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 65) erhält man

$$P(K \cap (\Xi_P \cup T_{\mathcal{C}}\Xi_P) = \emptyset) = \exp\left(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \cup T_{\mathcal{C}}\Xi_o) \oplus K)\right), \text{ wobei}$$

$$\begin{aligned} \Xi_o &= \{o\} \times [-R, +R] \quad \text{das typische Korn von } \Xi_P \text{ und} \\ T_{\mathcal{C}}\Xi_o &= \{o\} \times [r \sin(\alpha - \varphi) - R, r \sin(\alpha - \varphi) + R] \end{aligned}$$

das typische Korn vom verschobenen Streckenprozess $T_{\mathcal{C}}\Xi_P$ ist.

Nach Formel (1.3.4) in Stoyan u. a. (1995) und aufgrund der Stationarität gilt:

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \cup T_C \Xi_o) \oplus K)\right) &= \exp\left(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \oplus K) \cup (T_C \Xi_o \oplus K))\right) \\ &= \exp\left(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} 2\nu_2(\Xi_o \oplus K) + \frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \oplus K) \cap (T_C \Xi_o \oplus K))\right). \end{aligned}$$

Da $\exp(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2(\Xi_o \oplus K)) = \exp(-\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((0, \pi] \times [-R, +R])) = 1 - A_A$ ergibt sich:

$$P(K \cap (\Xi_P \cup T_C \Xi_P) = \emptyset) = (1 - A_A)^2 \exp\left(\frac{L_A}{\pi} \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \oplus K) \cap (T_C \Xi_o \oplus K))\right).$$

Somit gilt für die Kovarianz $C(\mathbf{r})$ des Poisson-Streifenprozesses:

$$C(\mathbf{r}) = 2A_A - 1 + (1 - A_A)^2 \exp\left(\frac{L_A}{\pi} \gamma_{\Xi_P}(\mathbf{r})\right),$$

wobei

$$\begin{aligned} \gamma_{\Xi_P}(\mathbf{r}) &= \gamma_{\Xi_P}(r, \varphi) = \mathbf{E} \nu_2((\Xi_o \oplus K) \cap (T_C \Xi_o \oplus K)) \\ &= \mathbf{E} \nu_2(\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p \in ([-R, +R] \cap [r \sin(\alpha - \varphi) - R, r \sin(\alpha - \varphi) + R])\}) \end{aligned}$$

als die Mengenkovarianz des Streckenprozesses Ξ_P bezeichnet wird.

(iii) Berechnung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$

Veranschaulicht ist $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ der Erwartungswert des Flächeninhalts der Schnittfläche

des Rechtecks: $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p \in [-R, +R]\}$ mit

dem „Schlauch“: $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p \in [r \sin(\alpha - \varphi) - R, r \sin(\alpha - \varphi) + R]\}$.

Für die Berechnung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ von Ξ_P werden im Folgenden verschiedene Fälle betrachtet ($\bar{R} = \mathbf{E}R$):

(a) $0 \leq r \leq 2\bar{R}$ (vgl. Abb. 2.10):

Der mittlere Flächeninhalt $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ der Schnittfläche ist durch folgende Integration gegeben (siehe Erläuterungen zu Abb. 2.10):

$$\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi) = \mathbf{E} \left(2\pi R - \int_{\varphi}^{\pi+\varphi} r \sin(\alpha - \varphi) d\alpha \right).$$

Durch lineare Substitution von $(\alpha - \varphi) = \beta$ ($d\alpha = d\beta$, neuer Integrationsbereich: $(0, \pi]$) zeigt sich die Unabhängigkeit der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ von φ . Daher wird der

Vektor $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ im Argument von γ_{Ξ_P} vereinfacht durch die reelle Zahl $r = \|\mathbf{r}\|$ ersetzt:

$$\gamma_{\Xi_P}(r) = \mathbf{E} \left(2\pi R - \int_0^\pi r \sin(\beta) d\beta \right) = \mathbf{E}(2\pi R - 2r) = 2\pi \bar{R} - 2r, \quad 0 \leq r \leq 2\bar{R}.$$

(b) $r > 2\bar{R}$ (vgl. Abb. 2.11):

Der Flächeninhalt $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ der Schnittfläche ist kleiner als im Fall (a). Für $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ sind nur solche α relevant, die im Bereich

$$(\varphi - \arcsin(2R/r)) \bmod \pi < \alpha \leq (\varphi + \arcsin(2R/r)) \bmod \pi$$

liegen. Unter Beachtung der Achsensymmetrie von „ $r \sin(\alpha - \varphi)$ “ bezüglich der senkrechten Geraden in $\alpha = \varphi + \pi/2$ ist der Flächeninhalt der Schnittfläche durch folgende Integration berechenbar (siehe auch Erläuterungen zu Abb. 2.11):

$$\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi) = 2\mathbf{E} \left(2R \arcsin(2R/r) - \int_\varphi^{\varphi + \arcsin(2R/r)} r \sin(\alpha - \varphi) d\alpha \right).$$

Analog wie in (a) zeigt sich durch lineare Substitution von $(\alpha - \varphi) = \beta$ ($d\alpha = d\beta$, Integrationsbereich wird zu $(0, \arcsin(2R/r))$) die Unabhängigkeit von $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ von φ , anstelle von (r, φ) wird nur $r = \|\mathbf{r}\|$ geschrieben:

$$\begin{aligned} \gamma_{\Xi_P}(r) &= 2\mathbf{E} \left(2R \arcsin(2R/r) - \int_0^{\arcsin(2R/r)} r \sin(\beta) d\beta \right) \\ &= 2\mathbf{E} [2R \arcsin(2R/r) - r(1 - \cos(\arcsin(2R/r)))] \\ &= 4\mathbf{E} [R \arcsin(2R/r)] + 2r\mathbf{E} \left[\sqrt{1 - \frac{4R^2}{r^2}} \right] - 2r, \quad r > 2\bar{R}. \end{aligned}$$

□

Die Funktion γ_{Ξ_P} und somit C sind (wie gewöhnlich bei isotropen Prozessen) nur vom Abstand r des Punktes $\mathbf{r}$ zum Nullpunkt abhängig. Die Gleichung $C(0) = A_A$ ist erfüllt. Für $r \rightarrow \infty$ gilt $\gamma_{\Xi_P}(r) \rightarrow 0$, d. h. $C(r) \rightarrow A_A^2$.

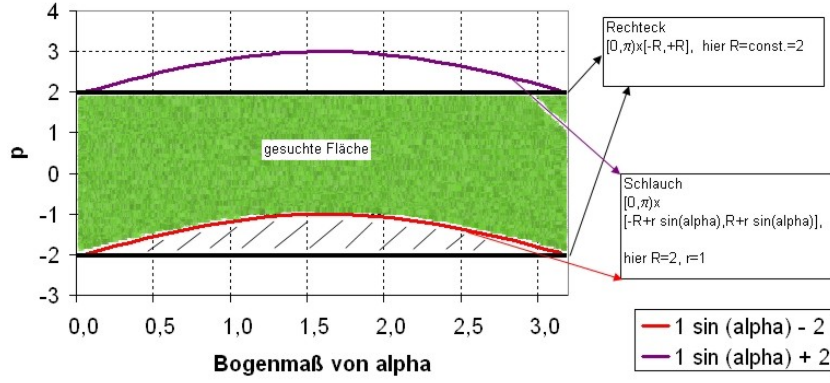


Abbildung 2.10: Veranschaulichung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ für $0 \leq r \leq 2R$, mit $(r, \varphi) = (1, 0)$ und $R=\text{konst.}=2$: Die Mengenkovarianz entspricht dem Inhalt der grünen Fläche, der sich durch Subtraktion des Flächeninhalts der schraffierten Fläche vom Inhalt $2R\pi$ der Rechtecksfläche $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p \in [-R, +R]\}$ ergibt. Der Flächeninhalt der schraffierten Fläche entspricht dem Integral $\int_0^\pi \sin \alpha \, d\alpha$ (allgemein: $\int_\varphi^{\pi+\varphi} r \sin(\alpha - \varphi) \, d\alpha$).

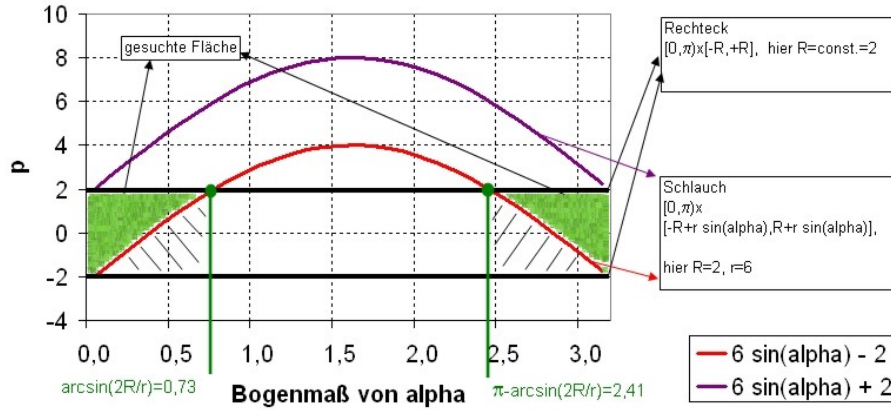


Abbildung 2.11: Veranschaulichung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ für $r > 2R$, mit $(r, \varphi) = (6, 0)$ und $R=\text{konst.}=2$: Die Mengenkovarianz entspricht dem Inhalt der grünen Fläche. Aufgrund der Achsensymmetrie von „ $r \sin(\alpha - \varphi)$ “ wird nur der Flächeninhalt der linken grünen Fläche betrachtet. Das Doppelte dieses Flächeninhalts ist dann γ_{Ξ_P} . Der Flächeninhalt der linken grünen Fläche ergibt sich durch Subtraktion des Flächeninhalts der schraffierten Fläche vom Inhalt der Rechtecksfläche $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \arcsin(2R/r)], p \in [-R, +R]\}$. Der Flächeninhalt der schraffierten Fläche entspricht dem Integral $\int_0^{\arcsin(2R/r)} 6 \sin \alpha \, d\alpha$ (allgemein: $\int_\varphi^{\varphi+\arcsin(2R/r)} r \sin(\alpha - \varphi) \, d\alpha$).

Beispiel 2.1.1. Gegeben ist ein Poisson-Streifenprozess mit Liniendichte $L_A = 1$ und konstanter Streifenbreite $R = 2$. Dann ergibt sich für die Kovarianz:

$$C(r) = \begin{cases} 1 - 2 \exp(-4) + \exp\left(-4 - \frac{2r}{\pi}\right), & 0 \leq r \leq 4, \\ 1 - 2 \exp(-4) + \exp\left(-\frac{2}{\pi} \left(4\pi + r - r\sqrt{1 - \frac{16}{r^2}} - 4 \arcsin(4/r)\right)\right), & r > 4. \end{cases}$$

Abbildung 2.12 zeigt die Kovarianz $C(r)$ dieses Poisson-Streifenprozesses mit Liniendichte $L_A = 1$ und halber Streifenbreite $R = 2$.

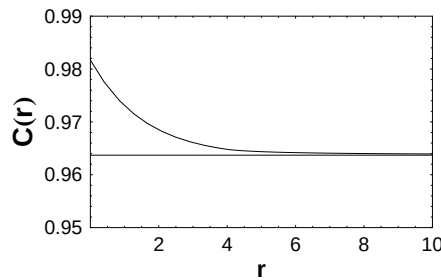


Abbildung 2.12: Kovarianz $C(r)$ eines Poisson-Streifenprozesses Ξ_G mit Liniendichte $L_A = 1$ und konstanter halber Streifenbreite $R = 2$.

2.2 Aus Punktprozessen konstruierte Zufallsfelder

2.2.1 Die Boolesche Funktion

Die Grundidee der Booleschen Funktion entstand bei der Modellierung von rauen Oberflächen und ist eine Verallgemeinerung des Booleschen Modells (Jeulin, 1979). Für eine vereinfachte Vorstellung zum Modell denke man sich beispielsweise rein zufällig auf einer Linie angeordnete Punkte. Jeder dieser Punkte bildet das Zentrum einer Funktion (z. B. einer Dreiecksfunktion). Überlagern sich an einem Punkt der Linie zwei Funktionen, so wird das Maximum der beiden Funktionswerte gebildet. Die resultierende Funktion ist dann eine Boolesche Funktion (Abb. 2.13). In Jeulin und Jeulin (1981) wurde mit einer Booleschen Funktion die Oberfläche von kaltgepressten Stahlplatten modelliert.

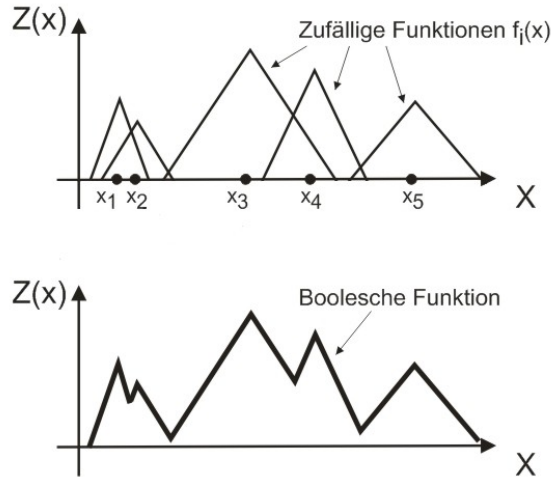


Abbildung 2.13: Oben: Die Punkte x_1 bis x_5 sind rein zufällig auf einer Linie angeordnet. Jeder Punkt bildet das Zentrum einer zufälligen Funktion $f_{B_i}(x)$, hier Dreiecksfunktionen. Unten: Überlagern sich an einem Punkt der Linie zwei Funktionen, so wird das Maximum der beiden Funktionswerte gebildet. Die resultierende Funktion ist dann eine Boolesche Funktion.

2.2.1.1 Definition

Analog zum Booleschen Modell wird die Boolesche Funktion aus zwei Elementen konstruiert (Serra, 1982, S. 470):

- (1) aus einem stationären Poisson-Prozess $\Phi = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots\}$ im $\mathbb{R}^d$ mit Intensität λ ,
- (2) aus einer zufälligen Funktion $f_B : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, \infty)$, die oberhalbstetig und fast sicher positiv mit kompakter Trägermenge ist.

Es sei nun f_{B_i} eine Realisierung der zufälligen Funktion f_B und $f_{B_i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ die in den Punkt $\mathbf{x}_i$ des Poisson-Prozesses Φ verschobene Funktion f_{B_i} . Für jeden Punkt $\mathbf{x}_i$ des Poisson-Prozesses Φ wird eine neue Realisierung f_{B_i} erzeugt. Die Funktion

$$Z_B(\mathbf{x}) = \sup_{\mathbf{x}_i \in \Phi} f_{B_i}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$$

ist dann eine Realisierung der sogenannten Booleschen (Zufalls-)Funktion mit primärer zufälliger Funktion f_B . Die Menge $\{Z_B(\mathbf{x})\}$ der Zufallsgrößen $Z_B(\mathbf{x})$ mit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ bildet das zugehörige Zufallsfeld, das ebenfalls Boolesche Funktion genannt wird. Im Kontext wird klar, ob die einzelne Zufallsgröße oder das Zufallsfeld gemeint ist. Es sei angemerkt, dass eine noch allgemeinere Definition in Jeulin (1991), S. 58, zu finden ist, die hier jedoch nicht benötigt wird.

2.2.1.2 Eindimensionale Verteilungsfunktion

Für die eindimensionale Verteilungsfunktion von $\{Z_B(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$, mit Intensität λ des Poisson-Prozesses und mit der primären Funktion f_B gilt (Serra, 1982):

$$P(Z_B(\mathbf{x}) < z) = \exp(-\lambda \mathbf{E}\nu_d(X_z(f_B))), \quad (2.30)$$

wobei $X_z(f_B)$ die Menge aller Punkte $\mathbf{x}$ mit $f_B(\mathbf{x}) \geq z$ ist.

Es sei angemerkt, dass sich die Menge $X_z(Z_B) = \{\mathbf{x} : Z_B(\mathbf{x}) \geq z\}$ durch ein Boolesches Modell beschreiben lässt (siehe Jeulin, 1991). Weitere Formeln und Eigenschaften zur Booleschen Funktion sind in Serra (1989) zu finden.

Beispiel 2.2.1. Sei $\{Z_B(x)\}$ gegeben durch $x \in \mathbb{R}$, $\lambda = n$ und sei die primäre Funktion f_B eine Dreiecksfunktion, d. h. $f_B(x) = h - \frac{h}{a}|x|$ für $-a \leq x \leq a$ und sonst $f_B(x) = 0$. Dann ist $\mathbf{E}\nu(X_z(f_B)) = \frac{\nu\{x: f_B(x) \leq z\}}{2a}$ für $-a \leq x \leq a$ und somit

$$P(Z_B(x) < z) = \exp\left(-n \left(\frac{h-z}{h}\right)\right), \quad 0 \leq z \leq h.$$

Die entsprechende Dichtefunktion lautet

$$f_{Z_B}(z) = \begin{cases} \frac{n}{h} \exp\left(\frac{n}{h}(z-h)\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.31)$$

2.2.2 Der Shot-Noise-Prozess

Der Shot-Noise-Prozess ist sehr universell anwendbar und wird in vielen Bereichen als Modell herangezogen, so z. B. in der Meteorologie, in den Werkstoffwissenschaften sowie in Teilgebieten der Physik. An einem einfachen Beispiel aus der Natur, der Interferenz von Wellen, soll das Grundprinzip eines Shot-Noise-Prozesses erläutert werden: Werden in einen ruhigen See mehrere Steine geworfen, so erzeugen diese Steine Wellen. Die Wellen breiten sich konzentrisch von der Eintrittsstelle des Steines im Wasser aus und werden mit zunehmender Entfernung zur Eintrittsstelle immer schwächer. Treffen zwei von unterschiedlichen Steinen verursachte Wellenberge aufeinander, so addiert sich deren Amplitude. Die entstandene unruhige Wasseroberfläche kann durch einen Shot-Noise-Prozess (im $\mathbb{R}^2$ auch Shot-Noise-Zufallsfeld genannt) modelliert werden, wobei die

Eintrittsstellen der Steine ins Wasser als „Shot“ und die konzentrische Ausbreitung der Wellen mit „Noise“ bezeichnet werden. Für eine vereinfachte abstraktere Vorstellung zum Modell denke man sich nun rein zufällig in der Ebene angeordnete Punkte. Von jedem Punkt geht ein Wirkungsprofil aus (z. B. kann es durch eine gedämpfte Sinusfunktion repräsentiert werden). Überlagern sich die Wirkungsprofile an einem Punkt der Ebene, werden die Funktionswerte addiert.

2.2.2.1 Definition

Sei $\Phi = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots\}$, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, ein Punktprozess im $\mathbb{R}^d$ und f_S eine beliebige messbare Funktion mit $f_S : \mathbb{R}^d \rightarrow [0, \infty)$, dann wird ein Prozess $\{Z_S(\mathbf{t})\}$, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^d$, mit

$$Z_S(\mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{x}_i \in \Phi} f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x}_i) \quad (2.32)$$

als Shot-Noise-Prozess bezeichnet. Wie in Schmidt (1985) angegeben, wird dabei angenommen, dass die Summe in (2.32) konvergiert.

Es ist $f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x}_i)$ die Stärke des Wirkungsprofils bei $\mathbf{t}$ ausgehend von $\mathbf{x}_i$. Für $d = 2$ wird $\{Z_S(\mathbf{t})\}$ auch als Shot-Noise-Zufallsfeld bezeichnet.

2.2.2.2 Kenngrößen

Kenngrößen des Shot-Noise-Prozesses für Punktprozesse sind u. a. in Schmidt (1985) zu finden. Hier seien exemplarisch die Formeln für den Erwartungswert, die Varianz und die Kovarianzfunktion eines Poissonschen Shot-Noise-Zufallsfeldes angegeben: Sei λ die Intensität eines zweidimensionalen stationären Poisson-Prozesses Φ , f_S eine messbare Funktion mit $f_S : \mathbb{R}^2 \rightarrow [0, \infty)$ und $Z_S(\mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{x}_i \in \Phi} f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x}_i)$, $\mathbf{t} \in \mathbb{R}^2$, das zugehörige Poissonsche Shot-Noise-Zufallsfeld, dann gilt (Schmidt, 1985):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[Z_S(\mathbf{t})] &= \lambda \int_{\mathbb{R}^2} f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}, \\ \text{var}[Z_S(\mathbf{t})] &= \lambda \int_{\mathbb{R}^2} [f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x})]^2 \, d\mathbf{x}, \\ \mathbf{E}[Z_S(\mathbf{t})Z_S(\mathbf{t} + \mathbf{h})] - \mathbf{E}[Z_S(\mathbf{t})]\mathbf{E}[Z_S(\mathbf{t} + \mathbf{h})] &= \lambda \int_{\mathbb{R}^2} f_S(\mathbf{t} - \mathbf{x})f_S(\mathbf{t} + \mathbf{h} - \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \end{aligned}$$

2.3 Aus Geradenprozessen konstruierte Zufallsfelder

Aus Geradenprozessen konstruierte Zufallsfelder entstanden wie die Boolesche Funktion (Kapitel 2.2.1) bei der Modellierung von rauen Oberflächen. Jeulin und Jeulin (1981) versuchten, die Oberfläche von kaltgepressten Stahlplatten mit solch einem Modell besser zu beschreiben als mit einer Booleschen Funktion (siehe 2.2.1). Im Kapitel 3 werden aus Geradenprozessen konstruierte Zufallsfelder zur Modellierung von Abtragsspuren auf einer Siliziumwaferoberfläche herangezogen.

In diesem Kapitel werden dazu notwendige grundlegende mathematische Betrachtungen dieser Zufallsfelder durchgeführt. Es werden zwei Konstruktionsmöglichkeiten, die Addition und die Maximierung, verfolgt. Da diese Zufallsfelder in der Literatur bisher noch wenig Beachtung fanden, mussten vorhandene Theorien vertieft sowie Formeln für den hier benötigten Spezialfall weiterführend analysiert und an die speziellen Erfordernisse angepasst werden.

2.3.1 Das Geraden-Shot-Noise-Feld

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem Geraden-Shot-Noise-(Zufalls-)feld, das in dieser Arbeit erstmalig betrachtet wird. Das Geraden-Shot-Noise-Feld beruht auf dem gleichen Grundprinzip wie der Shot-Noise-Prozess (für Erläuterungen zum Grundprinzip siehe Einleitung zu Kap. 2.2.2). In Tabelle 2.1 sind die Hauptelemente des klassischen Shot-Noise-Prozesses (Schmidt, 1985) und die des in dieser Arbeit zu analysierenden Geraden-Shot-Noise-Feldes vergleichend dargestellt.

Da der markierte Geradenprozess auch als markierter Punktprozess dargestellt werden kann (vgl. 2.1.3.2), erfolgt die Herleitung von Formeln für Kenngrößen des Geraden-Shot-Noise-Feldes teilweise analog der Herleitung von Formeln für den Shot-Noise-Prozess in Schmidt (1985). Ein wesentlicher Unterschied besteht jedoch in der Definition des Wirkungsprofils und der resultierenden Funktion w , die im Folgenden im Rahmen der Definition des Geraden-Shot-Noise-Feldes beschrieben werden. Aufgrund dieses Unterschiedes mussten einige gesonderte Betrachtungen durchgeführt werden. In dieser Arbeit werden nun die Formeln für wichtige Kenngrößen des Geraden-Shot-Noise-Feldes erstmalig angegeben und bewiesen. Alle Betrachtungen werden für den $\mathbb{R}^2$ und den ungerichteten Geradenprozess durchgeführt.

	Schmidt (1985) Shot-Noise-Prozess	Wiegand Geraden-Shot-Noise-Feld
„Shot-Prozess“	markierter Punktprozess im $\mathbb{R}^d$	markierter Geradenprozess im $\mathbb{R}^2 \hat{=}$ markierter Punktprozess in $(0, \pi] \times \mathbb{R}$
Operation	Addition	Addition
Wirkungs- profil	$f : \mathbb{R}^d \times M \rightarrow [0, \infty)$ messbar, Markenraum M	$f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ messbar, Markenraum M
Resultierende Funktion	$w = f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i, m_i)$ $w : \mathbb{R}^d \times M \rightarrow [0, \infty)$	$w = f(d(r, \varphi, \alpha_i, p_i), m_i)$ $w : [0, \infty) \times (0, 2\pi] \times (0, \pi] \times$ $\times \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$

Tabelle 2.1: Hauptelemente des Geraden-Shot-Noise-Feldes im Vergleich zu den Hauptelementen des klassischen Shot-Noise-Prozesses.

2.3.1.1 Definition

Das Geraden-Shot-Noise-Feld ist ähnlich zum bereits bekannten Shot-Noise-Prozess für Punktprozesse (Kap. 2.2.2) definiert, wobei als „Shot“-Prozess ein ebener ungerichteter Geradenprozess $\Psi = \{l_i\}$ verwendet wird. Gemäß den Ausführungen in 2.1.3 entspricht dem Geradenprozess Ψ im $\mathbb{R}^2$ der Geraden-Punktprozess Φ in $\mathcal{C}$. Jeder Geraden l_i sei eine reelle Marke m_i (mit Markenraum M und Markenverteilung $\mathcal{M}$) zugeordnet. An jeden Punkt einer Geraden des Prozesses wird weiterhin ein symmetrisches Wirkungsprofil (repräsentiert durch eine Funktion f) angeheftet. Überlagern sich die Wirkungsprofile verschiedener Geraden an einem Punkt, so addieren sich die entsprechenden Werte der Wirkungsprofile.

Sei also $\Psi_m = \{(l_i, m_i)\}$ ein markierter Geradenprozess mit messbarem Markenraum $[M, \mathfrak{M}]$ und $\Phi_m = \{((\alpha_i, p_i), m_i)\}$ der entsprechende Geraden-Punktprozess in $\mathcal{C}$. Der Abstand eines Punktes $\mathbf{x}$ der Ebene, gegeben in Polarkoordinaten $\mathbf{x} = (r, \varphi)$ mit $r \geq 0$ und $\varphi \in (0, 2\pi]$, zu einer Geraden l_i , gegeben in Koordinaten (α_i, p_i) des Parameterraums $\mathcal{C}$, ist:

$$d((r, \varphi), (\alpha_i, p_i)) = r \sin(\alpha_i - \varphi) - p_i, \quad (2.33)$$

d. h. $d : [0, \infty) \times (0, 2\pi] \times (0, \pi] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Weiterhin sei die Profilfunktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ gegeben.

Die Funktion $w : [0, \infty) \times (0, 2\pi] \times (0, \pi] \times \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ ist nun als Verkettung von f und d definiert:

$$w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i) = f(d(r, \varphi, \alpha_i, p_i), m_i).$$

Wie in Schmidt (1985) angenommen, seien f und daher w nichtnegativ und messbar.

Dann heit das zufllige Feld $\{Z_{GS}(r, \varphi)\}$ mit

$$Z_{GS}(r, \varphi) = \sum_{((\alpha_i, p_i), m_i) \in \Phi_m} w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i), \quad (r, \varphi) \in [0, \infty) \times (0, 2\pi] \quad (2.34)$$

Geraden-Shot-Noise-Feld, wobei analog Schmidt (1985) die Konvergenz der Summe in (2.34) angenommen wird.

Ausgedrckt durch die Gren im $\mathbb{R}^2$ ergibt sich fr das Geraden-Shot-Noise-Feld folgende verkrzte Schreibweise:

$$Z_{GS}(\mathbf{x}) = \sum_{(l_i, m_i) \in \Psi_m} f(d_1(\mathbf{x}, l_i), m_i), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

wobei d_1 eine Funktion ist, mit der der Abstand zwischen dem Punkt $\mathbf{x}$ und der Geraden l_i berechnet wird.

Die Funktion w ist also nicht analog Schmidt (1985) auf dem Raum $\mathbb{R}^d \times M$ definiert, sondern auf $[0, \infty) \times (0, 2\pi] \times \mathcal{C} \times M$, da fr die Berechnung der Kovarianz des Geraden-Shot-Noise-Feldes die Abstnde eines Punktes $\mathbf{x} = (r, \varphi)$ der Ebene zu den Geraden $\{l_i\} = \{(\alpha_i, p_i)\}$ des Prozesses wichtig sind.

Eigenschaft Stationaritt

Das in (2.34) definierte Geraden-Shot-Noise-Feld ist genau dann stationr, wenn der zugrunde liegende Geradenprozess stationr ist. Wenn das Zufallsfeld $\{Z_{GS}(\mathbf{x})\}$ stationr ist, gengt es fr die Berechnung eindimensionaler Verteilungen, Betrachtungen im Nullpunkt $(0, 0) = o$, d. h. fr $Z_{GS}(o)$, durchzufhren. Der Abstand des Nullpunktes zu einer Geraden mit Parametern (α_i, p_i) ist $-p_i$ (laut Definition von p in (2.33)). Somit ergibt sich fr $\mathbf{x} = (0, 0)$:

$$w(0, 0, \alpha_i, p_i, m_i) = f(-p_i, m_i).$$

Im Folgenden wird immer ein stationrer Geradenprozess vorausgesetzt, sodass bei der Berechnung des ersten und des zweiten Momentes mit $f(-p_i, m_i)$ anstelle von $w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i)$ gearbeitet wird.

Verallgemeinerungen

Es werden nun einige Verallgemeinerungsansätze angeführt. Eine vollständige Verallgemeinerung ist jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht erforderlich.

- Für die Modellierung eines nicht symmetrischen Wirkungsprofils muss ein gerichteter Geradenprozess betrachtet werden.
- Ähnlich zum ursprünglichen Shot-Noise-Feld für Punktprozesse kann f statt über die Distanz über den Distanzvektor definiert werden.
- Das Wirkungsprofil könnte entlang einer Geraden variiert werden.
- Statt Geraden könnten auch andere zufällige Mengen als „Shot-Prozess“ betrachtet werden.

2.3.1.2 Erstes Moment bzw. Erwartungswert

Satz 2.3.1. *Gegeben sei ein stationärer markierter Geradenprozess Ψ_m im $\mathbb{R}^2$ mit endlicher Liniendichte L_A und der Markenverteilung $\mathcal{M}$. Die Funktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ sei messbar. Der Erwartungswert des Geraden-Shot-Noise-Feldes $\mathbf{E}Z_{GS}(o)$ existiert und es gilt:*

$$\mathbf{E}Z_{GS}(o) = L_A \bar{f}, \quad (2.35)$$

wobei

$$\bar{f} = \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(dm) dp$$

ist. Die Richtungsrose $\mathcal{R}$ des stationären Geradenprozesses Ψ_m spielt dabei keine Rolle.

Beweis. Aufgrund der Darstellung (2.34) des Geraden-Shot-Noise-Feldes $Z_{GS}(o)$ kann analog Schmidt (1985) für die Berechnung des Erwartungswertes $\mathbf{E}Z_{GS}(o)$ das Campbell-Theorem (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 106/108) herangezogen werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}Z_{GS}(o) &= \mathbf{E} \sum_{((\alpha, p), m) \in \Phi_m} f(-p, m) \\ &= \int_{(0, \pi] \times \mathbb{R} \times M} f(-p, m) \mu^{(1)}(d(\alpha, p, m)), \end{aligned}$$

wobei $\mu^{(1)}$ das erste Momentenmaß des stationären markierten Geradenprozesses Ψ_m bezeichnet.

Da die Funktion f nichtnegativ und messbar ist, existiert obiges Integral und somit auch der Erwartungswert, der aber unendlich sein kann.

Aufgrund der vorausgesetzten Stationarität von Ψ_m vereinfacht sich $\mu^{(1)}$ gemäß (2.17) zu:

$$\mu^{(1)}(W \times P \times L) = L_A \mathcal{R}(W) \nu(P) \mathcal{M}(L),$$

wobei $W \subseteq (0, \pi]$, $P \subseteq \mathbb{R}$, $L \subseteq M$, $\mathcal{R}$ die Richtungsrose des Geradenprozesses Ψ_m , ν das Lebesgue-Maß und $\mathcal{M}$ die Markenverteilung von Ψ_m ist. Da $\int_{(0, \pi]} \mathcal{R}(d\alpha) = 1$ ist, folgt die Behauptung. $\square$

Bemerkung: Ist f eine beschränkte Funktion mit kompakter Trägermenge und die Liniendichte L_A endlich, so ist der Erwartungswert von $Z_{GS}(o)$ immer endlich.

Wird nun ein Geradenprozess Ψ_m betrachtet, bei dem die Marken $\{m_i\}$ aller Geraden den gleichen Wert besitzen, dann ist in $f(-p, m)$ die Variable m eine Konstante. Somit ist die Funktion f nur noch von einer Veränderlichen abhängig, dem Abstand p des Nullpunktes zu einer Geraden l von Ψ . Vereinfachend wird für diesen Spezialfall die Funktion

$$g(-p) := f(-p, m)$$

eingeführt.

Folgerung 2.3.1. *Sind bei dem Geradenprozess Ψ_m die Marken aller Geraden gleich, so ist der Erwartungswert von $Z_{GS}(o)$ nur vom Flächeninhalt abhängig:*

$$\mathbf{E}Z_{GS}(o) = L_A \int_{\mathbb{R}} g(-p) dp. \quad (2.36)$$

Beispiele: Motiviert sind die verschiedenen Wirkungsprofile in Abbildung 2.14 durch die spätere Anwendung des Geraden-Shot-Noise-Feldes auf den Abtragsprozess beim CMP. Es wird angenommen, dass der Geradenprozess Ψ_m isotrop ist und zunächst die Marken aller Geraden gleich sind. Das Querschnittsprofil der Abtragungsspur eines Partikels auf der Waferoberfläche kann mit verschiedenen Funktionen approximiert werden, die in Abbildung 2.14 gezeigt werden. Zu diesen Funktionen sind in Tabelle 2.2 die Erwartungswerte aufgeführt.

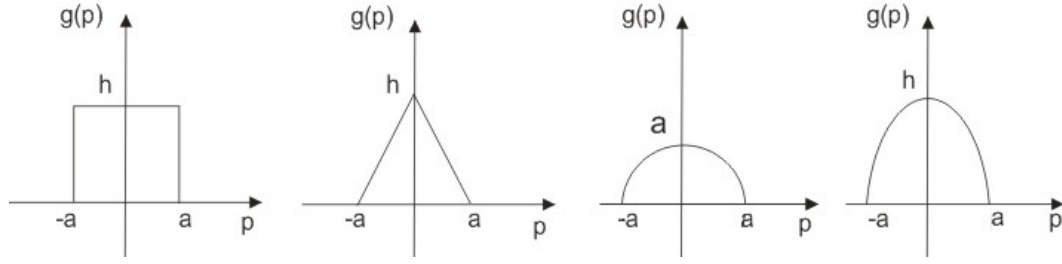


Abbildung 2.14: Beispiele für die Funktion g (von links nach rechts): Rechtecksfunktion, Dreiecksfunktion, Halbkreisfunktion, quadratische Funktion.

Wirkungsprofil	Gleichung	Erwartungswert von $Z_{GS}(o)$
Rechtecksfunktion	$g(p) = \begin{cases} h, & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$2 L_A a h$
Dreiecksfunktion	$g(p) = \begin{cases} h \cdot \left(1 - \frac{ p }{a}\right), & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$L_A a h$
Halbkreisfunktion	$g(p) = \begin{cases} \sqrt{a^2 - p^2}, & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$\frac{1}{2} L_A a^2 \pi$
quadratische Funktion	$g(p) = \begin{cases} h \cdot \left(1 - \frac{p^2}{a^2}\right), & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$\frac{4}{3} L_A a h$

Tabelle 2.2: Erwartungswerte für das Geraden-Shot-Noise-Feld mit verschiedenen Wirkungsprofilen.

Seien nun die Parameter a und h der quadratischen Funktion zufällig, d. h. durch die Marke m gemäß der Verteilung $\mathcal{M}$ bestimmt. Man setze beispielsweise für die Marke m den zufälligen Durchmesser eines Partikels, der beim Polierprozess an einer Waferoberfläche Abtrag bewirkt. In Luo und Dornfeld (2001) wird dieser Partikeldurchmesser durch eine Normalverteilung mit den Parametern $\mu = 80$ nm und $\sigma = 15$ nm angenähert. Das Querschnittsprofil einer Abtragsspur auf der Waferoberfläche sei:

$$f(p, m) = \begin{cases} c \cdot m \cdot \left(1 - \frac{p^2}{m^2}\right), & -m < p < m, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei $m \sim N(80, 15^2)$ und $c = \text{konst.} \geq 0$ ist.

Anwendung von Formel (2.35) ergibt für den Erwartungswert des Zufallsfeldes

$$\begin{aligned}
 \mathbf{E}Z_{GS}(o) &= L_A \int_0^\infty \int_{-m}^m c \cdot m \cdot \left(1 - \frac{p^2}{m^2}\right) dp \mathcal{M}(dm) \\
 &= L_A \int_0^\infty \int_{-m}^m c \cdot m \cdot \left(1 - \frac{p^2}{m^2}\right) \cdot \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(m-\mu)^2}{2 \cdot \sigma^2}\right) dp dm \\
 &= L_A \cdot c \cdot \frac{2}{3} \left(\exp\left(-\frac{\mu^2}{2\sigma^2}\right) \mu \sigma \sqrt{\frac{2}{\pi}} + (\mu^2 + \sigma^2) + (\mu^2 + \sigma^2) \cdot \operatorname{erf}\left(\frac{\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right),
 \end{aligned}$$

wobei

$$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt$$

ist. Für $\mu = 80$ und $\sigma = 15$ erhält man

$$\mathbf{E}Z_{GS}(o) = \frac{50}{3} c L_A \left(\frac{48 \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}}}{e^{128/9}} + 265 \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{8\sqrt{2}}{3}\right) \right) \right) \approx 8833,33 c L_A.$$

Andere typische Verteilungsansätze wie z. B. Lognormalverteilung, Exponentialverteilung, Weibullverteilung oder Gleichverteilung können ebenso durchgerechnet werden.

2.3.1.3 Zweites Moment und Kovarianz

Satz 2.3.2. *Gegeben sei ein stationärer markierter Geradenprozess Ψ_m im $\mathbb{R}^2$ mit endlicher Liniendichte L_A , der Richtungsrose $\mathcal{R}$ und der Markenverteilung $\mathcal{M}$. Die Funktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ sei messbar. Ψ_m sei unabhängig markiert, d. h. die m_i seien untereinander unabhängig und unabhängig von dem Geradenprozess Ψ . Des Weiteren seien die Winkel $\{\alpha_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$ untereinander unabhängig und unabhängig von den Abständen $\{p_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$. Das zweite Moment $\mathbf{E}[Z_{GS}(o)^2]$ des Geraden-Shot-Noise-Feldes existiert und es gilt:*

$$\mathbf{E}[Z_{GS}(o)^2] = L_A \cdot \bar{f}^{(2)} + L_A^2 \cdot \bar{f}^{(11)}, \quad (2.37)$$

mit

$$\bar{f}^{(2)} = \int_{\mathbb{R}} \int_M [f(-p, m)]^2 \mathcal{M}(dm) dp \quad (2.38)$$

und

$$\bar{f}^{(11)} = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_M \int_M f(-p, m) f(-p - h, m') \mathcal{M}(dm) \mathcal{M}(dm') dp \mathcal{K}(dh). \quad (2.39)$$

Dabei bezeichnet $\mathcal{K}(dh)$ das zweite reduzierte Momentenmaß des eindimensionalen stationären Punktprozesses $\{p_i\}$. Die Richtungsrose $\mathcal{R}$ des Geradenprozesses Ψ_m spielt keine Rolle.

Beweis. Aufgrund der Darstellung (2.34) des Shot-Noise-Geraden-Feldes $Z_{GS}(\mathbf{x})$ kann analog Schmidt (1985) das modifizierte Campbell-Theorem für zweite Momente zur Herleitung des zweiten Momentes von $Z_{GS}(o)$ verwendet werden:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[Z_{GS}(o)^2] &= \mathbf{E} \left[\sum_{((\alpha, p), m) \in \Phi_m} f(-p, m) \right]^2 \\ &= \int_{[(0, \pi] \times \mathbb{R} \times M]^2} f(-p, m) f(-p', m') \mu^{(2)}(d(\alpha, p, m, \alpha', p', m')), \end{aligned} \quad (2.40)$$

wobei $\mu^{(2)}$ das zweite Momentenmaß des stationären markierten Geradenprozesses Ψ_m bezeichnet (vgl. Definition in (2.18)).

Da die Funktion f nichtnegativ und messbar ist, ist auch das Produkt aus $f(-p, m) \cdot f(-p', m')$ nichtnegativ und messbar. Damit existiert das Integral (2.40) und somit auch das zweite Moment, das ebenfalls wieder unendlich sein kann.

Wie in Schmidt (1985) wird das Integral (2.40) nun in zwei Summanden zerlegt, sodass (α, p, m) und (α', p', m') in einem Summand verschieden und im anderen Summand gleich sind. Aufgrund von Formel (2.17) und dem unabhängigen Markieren von Ψ_m ergibt sich:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[Z_{GS}(o)^2] &= L_A \int_{(0, \pi]} \int_{\mathbb{R}} \int_M [f(-p, m)]^2 \mathcal{M}(dm) dp \mathcal{R}(d\alpha) + \\ &+ \int_{[(0, \pi] \times \mathbb{R}]^2} \int_M \int_M f(-p, m) f(-p', m') \mathcal{M}(dm) \mathcal{M}(dm') \alpha_r^{(2)}(d(\alpha, p, \alpha', p')), \end{aligned}$$

wobei $\alpha_r^{(2)}$ das zweite faktorielle Momentenmaß des stationären unmarkierten Geradenprozesses Ψ ist (vgl. Definition in (2.14)).

Durch Anwendung der für den stationären Geradenprozess in dieser Arbeit erstmalig angegeben und bewiesenen Formel (2.16) aus Abschnitt 2.1.3.3 erhält man:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[Z_{GS}(o)^2] &= L_A \int_{(0, \pi]} \int_{\mathbb{R}} \int_M [f(-p, m)]^2 \mathcal{M}(dm) dp \mathcal{R}(d\alpha) + \\ &+ L_A^2 \left(\int_{(0, \pi]} \mathcal{R}(d\alpha) \right)^2 \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_M \int_M f(-p, m) f(-p-h, m') \mathcal{M}(dm) \mathcal{M}(dm') dp \mathcal{K}(dh). \end{aligned}$$

Anwendung des Satzes von Fubini und Gültigkeit von $\int_{(0, \pi]} \mathcal{R}(d\alpha) = 1$ ergibt die Behauptung. $\square$

Folgerung 2.3.2. Gegeben sei ein stationärer markierter Geradenprozess Ψ_m im $\mathbb{R}^2$ mit endlicher Liniendichte L_A , der Richtungsrose $\mathcal{R}$ und der Markenverteilung $\mathcal{M}$. Die Funktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ sei messbar. Dabei sei Ψ_m unabhängig markiert, d. h. die m_i seien untereinander unabhängig und auch unabhängig vom Geradenprozess Ψ . Des Weiteren seien die Winkel $\{\alpha_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$ untereinander unabhängig und wiederum unabhängig von den Abständen $\{p_i\}$ der Geraden $\{l_i\}$. Sei $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ in Polarkoordinaten $\mathbf{x} = (r, \varphi)$ gegeben. Für das Geraden-Shot-Noise-Feld $Z_{GS}(\mathbf{x})$ existiert die Kovarianz $\mathbf{E}[Z_{GS}(o) Z_{GS}(r, \varphi)]$ und es gilt:

$$\mathbf{E}[Z_{GS}(o) Z_{GS}(r, \varphi)] = L_A \cdot \bar{f}^{(12)}(r, \varphi) + L_A^2 \int_{\mathbb{R}} \int_0^\pi \int_M \int_M \int_M f(-p, m) f(r \sin(\alpha - \varphi) - p - h, m') \mathcal{M}(dm) dp \mathcal{M}(dm') \mathcal{R}(d\alpha) \mathcal{K}(dh) \quad (2.41)$$

wobei $\bar{f}^{(12)}(r, \varphi) = \int_{\mathbb{R}} \int_0^\pi \int_M f(-p, m) f(r \sin(\alpha - \varphi) - p, m) \mathcal{M}(dm) \mathcal{R}(d\alpha) dp$ ist.

Beweis. Übertragung der Bewesideen zu Folgerung 1 in Schmidt (1985) auf das Geraden-Shot-Noise-Feld liefert die Behauptung. $\square$

Bemerkung: Ist f eine beschränkte Funktion mit kompakter Trägermenge und die Liniendichte L_A endlich, so sind das zweite Moment und die Kovarianz von $Z_{GS}(o)$ immer endlich.

2.3.1.4 Poissonsches Geraden-Shot-Noise-Feld

Sei $\Psi_P = \{l_i, m_i\}$ ein markierter isotroper und stationärer Poisson-Geradenprozess mit Liniendichte L_A und der Markenverteilung $\mathcal{M}$ und $\Phi_P = \{((\alpha_i, p_i), m_i)\}$ der entsprechende markierte isotrope Poissonsche Geraden-Punktprozess.

Dann heißt das zufällige Feld $\{Z_P(r, \varphi)\}$ mit

$$Z_P(r, \varphi) = \sum_{((\alpha_i, p_i), m_i) \in \Phi_P} w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i), \quad (r, \varphi) \in [0, \infty) \times (0, 2\pi] \quad (2.42)$$

Poissonsches Geraden-Shot-Noise-Feld, wobei w wie in Abschnitt 2.3.1.1 definiert ist und analog Schmidt (1985) die Konvergenz der Summe in (2.42) angenommen wird.

Satz 2.3.3. Für das zweite Moment, die Varianz und die Kovarianzfunktion eines isotropen und stationären Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes Z_P mit Liniendichte L_A gilt:

$$\mathbf{E}[Z_P(o)^2] = L_A \cdot \bar{f}^{(2)} + [L_A \cdot \bar{f}]^2, \quad (2.43)$$

$$\mathbf{var}[Z_P(o)] = L_A \cdot \bar{f}^{(2)}, \quad (2.44)$$

$$k(r) = L_A \cdot \bar{f}_P^{(12)}(r), \quad r \geq 0. \quad (2.45)$$

Dabei ist $k(r)$ die Kovarianzfunktion und

$$\bar{f}^{(2)} = \int_{\mathbb{R}} \int_M [f(-p, m)]^2 \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathrm{d}p, \quad \bar{f} = \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathrm{d}p$$

sowie

$$\bar{f}_P^{(12)}(r) = \frac{1}{\pi} \int_{(0, \pi]} \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) f(r \sin \alpha - p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathrm{d}p \mathrm{d}\alpha.$$

Beweis. Formel (2.43): Aufgrund des Satzes 2.3.2 mit Formel (2.37) ist lediglich noch die Gültigkeit von

$$\bar{f}^{(11)} = [\bar{f}]^2$$

für den isotropen Poisson-Geradenprozess zu beweisen.

Für einen isotropen Poisson-Geradenprozess gilt bekanntlich $\mathcal{K}(\mathrm{d}h) = \mathrm{d}h$. Somit vereinfacht sich $\bar{f}^{(11)}$ in (2.39) zu

$$\bar{f}^{(11)} = \int_{\mathbb{R}} \int_{\mathbb{R}} \int_M \int_M f(-p, m) f(-p - h, m') \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m') \mathrm{d}p \mathrm{d}h.$$

Durch Vertauschen der Integrationsreihenfolge (Satz von Fubini) und Verwendung von Unabhängigkeiten erhält man

$$\bar{f}^{(11)} = \int_{\mathbb{R}} \left(\int_M f(-p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p - h, m') \mathcal{M}(\mathrm{d}m') \mathrm{d}h \right) \mathrm{d}p.$$

Lineare Substitution von $p + h = t$ ($\mathrm{d}h = \mathrm{d}t$, Integrationsbereich $\mathbb{R}$ bleibt) führt zu

$$\begin{aligned} \bar{f}^{(11)} &= \int_{\mathbb{R}} \left(\int_M f(-p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-t, m') \mathcal{M}(\mathrm{d}m') \mathrm{d}t \right) \mathrm{d}p \\ &= \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathrm{d}p \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-t, m') \mathcal{M}(\mathrm{d}m') \mathrm{d}t. \end{aligned}$$

Umbenennen der Integrationsvariablen t in p und m' in m ergibt die Behauptung $\bar{f}^{(11)} = \left[\int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(\mathrm{d}m) \mathrm{d}p \right]^2 = [\bar{f}]^2$.

Formel (2.44): Für die Varianz gilt bekanntlich

$$\mathbf{var}[Z_P(o)] = \mathbf{E}[Z_P(o)^2] - [\mathbf{E}Z_P(o)]^2.$$

Einsetzen der Formeln (2.43) und (2.35) liefert

$$\mathbf{var}[Z_P(o)] = L_A \bar{f}^{(2)} + [L_A \bar{f}]^2 - [L_A \bar{f}]^2 = L_A \bar{f}^{(2)}.$$

Formel (2.45): Ausgangspunkt ist die Formel (2.41) in Folgerung 2.3.2, die sich für den isotropen Poisson-Geradenprozess aufgrund der Gültigkeit von $\mathcal{K}(dh) = dh$ und $\mathcal{R}(d\alpha) = \frac{1}{\pi} d\alpha$ wie folgt vereinfacht:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[Z_P(o) Z_P(r, \varphi)] &= L_A \cdot \bar{f}_{PP}^{(12)}(r, \varphi) + \\ &L_A^2 \int_{\mathbb{R}} \int_{(0, \pi]} \int_M \int_{\mathbb{R}} \int_M \frac{1}{\pi} f(-p, m) f(r \sin(\alpha - \varphi) - p - h, m') \mathcal{M}(dm) dp \mathcal{M}(dm') d\alpha dh, \end{aligned}$$

wobei

$$\bar{f}_{PP}^{(12)}(r, \varphi) = \int_{\mathbb{R}} \int_{(0, \pi]} \int_M \frac{1}{\pi} f(-p, m) f(r \sin(\alpha - \varphi) - p, m) \mathcal{M}(dm) d\alpha dp$$

ist. Da der Geradenprozess isotrop ist, kann $\varphi = 0$ gesetzt werden. Aufgrund der Gültigkeit von $k(r) = \mathbf{E}Z_P(o)Z_P(o+r) - [\mathbf{E}Z_P(o)]^2$ für eine Kovarianzfunktion $k(r)$ im isotropen Fall ist noch zu zeigen, dass

$$L_A^2 \int_{\mathbb{R}} \int_0^\pi \int_M \int_{\mathbb{R}} \int_M \frac{1}{\pi} f(-p, m) f(r \sin \alpha - p - h, m') \mathcal{M}(dm) dp \mathcal{M}(dm') d\alpha dh = [\mathbf{E}Z_P(o)]^2$$

gilt. Vertauschen der Integrationsreihenfolge und Verwendung von Unabhängigkeiten ergibt für die linke Seite I der obigen Gleichung:

$$I = L_A^2 \int_{\mathbb{R}} \left(\int_M f(-p, m) \mathcal{M}(dm) \int_{\mathbb{R}} \int_0^\pi \int_M \frac{1}{\pi} f(r \sin \alpha - p - h, m') \mathcal{M}(dm') d\alpha dh \right) dp.$$

Lineare Substitution von $-r \sin \alpha + p + h = t$ ($dh = dt$, Integrationsbereich $\mathbb{R}$ bleibt) führt zu

$$I = L_A^2 \int_{\mathbb{R}} \left(\int_M f(-p, m) \mathcal{M}(dm) \int_{\mathbb{R}} \int_0^\pi \int_M \frac{1}{\pi} f(-t, m') \mathcal{M}(dm') d\alpha dt \right) dp.$$

Durch Umbenennen der Integrationsvariablen t in p , m' in m erhält man

$$I = L_A \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(dm) dp \cdot L_A \int_{\mathbb{R}} \int_M f(-p, m) \mathcal{M}(dm) dp = \mathbf{E}Z_P(o) \mathbf{E}Z_P(o).$$

□

Bemerkung: Zur Berechnung der Kovarianzfunktion (Formel (2.45)) wird bei beschränkten Funktionen $f(p, m)$ mit kompakter Trägermenge K_A ,

$$K_A = \{(p, m) \in \mathbb{R} \times M : -a \leq p \leq a, m \in E \subseteq M\}, \quad a \in \mathbb{R}, E \text{ kompakt},$$

das Integrationsgebiet betrachtet, außerhalb dessen das Produkt $f(-p, m) \cdot f(r \sin \alpha - p, m)$ null ist. Für $0 \leq r \leq 2a$ gilt:

$$f(-p, m) \cdot f(r \sin \alpha - p, m) = 0 \quad \text{außerhalb der Menge } K_B,$$

$$K_B = \{(p, \alpha, m) : -a + r \sin \alpha \leq p \leq a, \alpha \in (0, \pi], m \in E\}$$

(da $f(-p, m) = 0$ für $p \in (-\infty, -a) \cup (a, \infty)$, $f(r \sin \alpha - p, m) = 0$ für $p \in (-\infty, -a + r \sin \alpha) \cup (a + r \sin \alpha, \infty)$ und $r \sin \alpha \geq 0$ für beliebiges $\alpha \in (0, \pi]$).

Für $r > 2a$ muss der Integrationsbereich für α eingeschränkt werden. Es ist anschaulich klar: Je größer im $\mathbb{R}^2$ der Abstand von $\mathbf{r}$ zu o ist, desto kleiner ist die Menge von Geraden, zu denen o und $\mathbf{r}$ zugleich einen so kleinen Abstand haben, dass beide Abstände in der Trägermenge von f liegen (vgl. Abb. 2.15).

Es gilt für $r > 2a$:

$$f(-p, m) \cdot f(r \sin \alpha - p, m) = 0 \quad \text{außerhalb der Menge } K_C,$$

$$K_C = \{(p, \alpha, m) : -a + r \sin \alpha \leq p \leq a, \alpha \in ((0, \arcsin(2a/r)] \cup [\pi - \arcsin(2a/r), \pi]), m \in E\}.$$

Damit ergibt sich für beschränkte Funktionen f mit kompakter Trägermenge K_A die folgende Kovarianzfunktion (Poissonsches Geraden-Shot-Noise-Feld):

$$k(r) = \begin{cases} \frac{L_A}{\pi} \int_0^\pi \int_{-a+r \sin \alpha}^a \int_E f(-p, m) \cdot f(r \sin \alpha - p, m) \mathcal{M}(dm) dp d\alpha, & 0 \leq r \leq 2a, \\ 2 \frac{L_A}{\pi} \int_0^{\arcsin(2a/r)} \int_{-a+r \sin \alpha}^a \int_E f(-p, m) \cdot f(r \sin \alpha - p, m) \mathcal{M}(dm) dp d\alpha, & r > 2a. \end{cases} \quad (2.46)$$

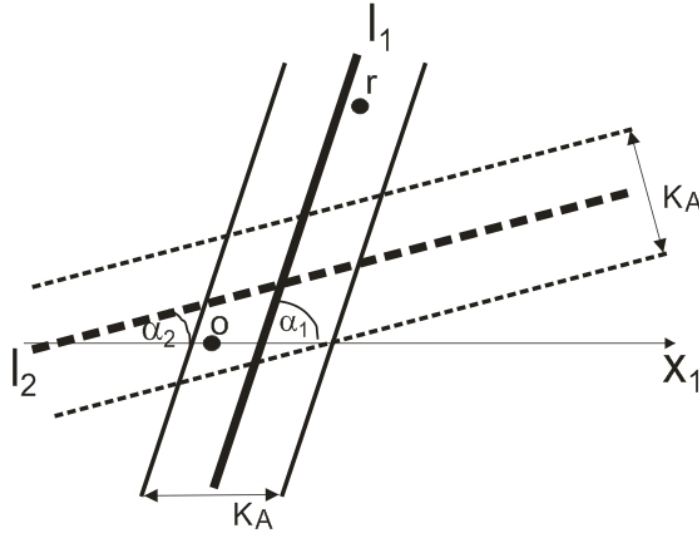


Abbildung 2.15: Veranschaulichung der Bedeutung des Winkels von Geraden für die Kovarianzfunktion des Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes für große r : Nur wenn eine Gerade einen bestimmten Winkel α hat, sind die Abstände von o und r zu dieser Geraden so klein, dass beide Abstände in der Trägermenge von f liegen. Im Beispiel ist die beschränkte Trägermenge K_A der Funktion f bezüglich der zwei Geraden durch dünnere Linien eingezeichnet. Der Wert der Funktion f bezüglich der Geraden l_1 mit Winkel α_1 (durchgezogene Linie) ist in beiden Punkten o und r ungleich null. Bezüglich der Geraden l_2 mit Winkel α_2 (gestrichelte Linie) ist dagegen der Wert von f in r null (r liegt nicht in der Trägermenge). Das Integrationsgebiet in Formel (2.45) ist daher bezüglich α einzuschränken.

Beispiel 2.3.1. Das Wirkungsprofil ist eine Rechtecksfunktion, die Marken aller Geraden sind gleich: $g(p) = h$ für $-a \leq p \leq a$, sonst $g(p) = 0$. Dann ergibt sich für die Varianz des Zufallsfeldes durch Anwendung der Formel (2.44): $\text{var}[Z_P] = 2 L_A h^2 a$.

Für die Kovarianzfunktion erhält man mit Formel (2.46):

$$k(r) = \begin{cases} 2 \frac{L_A}{\pi} h^2 (a\pi - r), & 0 \leq r \leq 2a, \\ 2 \frac{L_A}{\pi} h^2 \left(-r + r \sqrt{1 - \frac{4a^2}{r^2}} + 2a \arcsin \left(\frac{2a}{r} \right) \right), & r > 2a. \end{cases}$$

Beispiel 2.3.2. Das Wirkungsprofil ist eine quadratische Funktion, die Marken aller Geraden sind gleich: $g(p) = h \cdot \left(1 - \frac{p^2}{a^2} \right)$ für $-a \leq p \leq a$, sonst $g(p) = 0$. Dann erhält man für die Varianz des Zufallsfeldes: $\text{var}[Z_P] = \frac{16}{15} L_A h^2 a$.

Für die Kovarianzfunktion ergibt sich:

$$k(r) = \begin{cases} \frac{L_A}{\pi} \frac{2h^2(120a^5\pi - 75a^3\pi r^2 + 100a^2r^3 - 4r^5)}{225a^4}, & 0 \leq r \leq 2a, \\ \frac{4h^2L_A}{225a^4\pi} \left(62a^4r\sqrt{1-\frac{4a^2}{r^2}} + 2a^2r^3 \left(25 - 23\sqrt{1-\frac{4a^2}{r^2}} \right) + 2r^5 \left(-1 + \sqrt{1-\frac{4a^2}{r^2}} \right) \right) + \\ + \frac{60h^2L_A}{225a^4\pi} \arcsin(2a/r)(8a^5 - 5a^3r^2), & r > 2a. \end{cases}$$

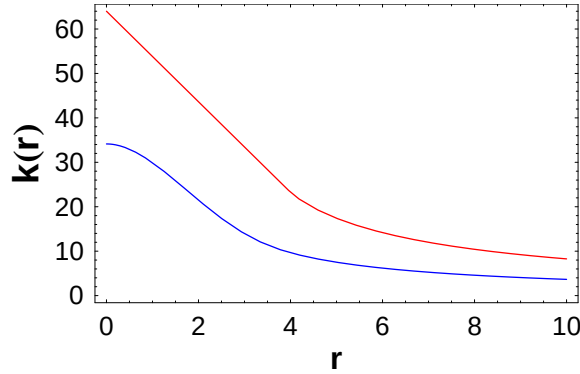


Abbildung 2.16: Kovarianzfunktion $k(r)$ des Geraden-Shot-Noise-Feldes mit Rechtecksfunktion (rot) und quadratischer Funktion (blau), wobei $L_A = 1$, $h = 4$ und $a = 2$.

Wenn die Marken der Geraden zufällig sind, können analoge Beispiele durchgerechnet werden.

2.3.2 Das Geraden-Maximum-Feld

Das Geraden-Maximum-Feld ist ein weiteres Modell für ein Zufallsfeld im $\mathbb{R}^2$. Grundlage dieses Zufallsfeldes sind ähnlich wie beim Geraden-Shot-Noise-Feld zufällige Geraden und eine Funktion f . Im Unterschied zum Geraden-Shot-Noise-Feld wird bei Überlagerung der Funktionswerte von f an einem Punkt des Feldes anstelle der Summe das Maximum der Funktionswerte gebildet.

Das Geraden-Maximum-Feld ist eine Verallgemeinerung der Booleschen Funktion (Serra, 1987). Während die Boolesche Funktion (vgl. Kapitel 2.2.1) von einem Punktprozess ausgeht, basiert das Geraden-Maximum-Feld auf einem Geradenprozess. Derartige Ansätze zur Übertragung des Prinzips der Booleschen Funktion auf Geradenprozesse sind bereits in Serra (1982), Kap. H, unter dem Begriff „Poisson function“ sowie in

Jeulin und Jeulin (1981) unter dem Begriff „Poisson surface“ zu finden. Zur Charakterisierung der Poisson-Funktion betrachtet Serra (1982) die Niveaumenge der mit einer beliebigen kompakten konvexen Menge $K \subset \mathbb{R}^3$ dilatierten Poisson-Funktion und gibt eine Formel für die zugehörige Leerwahrscheinlichkeit an. Eine analoge Formel ist in Jeulin und Jeulin (1981) zu finden.

Durch Spezialisierung der allgemeinen Formel von Serra (1982) wird hier die eindimensionale Verteilungsfunktion für das Geraden-Maximum-Feld angegeben. Des Weiteren wird gezeigt, dass Niveaumengen von speziellen Geraden-Maximum-Feldern Poisson-Streifenprozesse bilden. Somit können die in Kapitel 2.1.4 entwickelten Formeln für charakteristische Kenngrößen des Poisson-Streifenprozesses auch zur Charakterisierung von Maximum-Geraden-Feldern herangezogen werden.

2.3.2.1 Definition

Neben der Definition des Geraden-Maximum-Feldes werden in diesem Abschnitt die verwendeten Begriffe „oberhalbstetig“ und „Niveaumenge“ erklärt.

Das Geraden-Maximum-Feld ist ähnlich zur bereits bekannten Booleschen Funktion (Kap. 2.2.1.1) definiert, wobei anstelle des Punktprozesses ein ebener ungerichteter Geradenprozess $\Psi = \{l_i\}$ verwendet wird. Gemäß den Ausführungen in 2.1.3 entspricht dem Geradenprozess Ψ im $\mathbb{R}^2$ der Geraden-Punktprozess Φ in $\mathcal{C}$. Jeder Geraden l_i sei eine reelle Marke m_i (mit Markenraum M und Markenverteilung $\mathcal{M}$) zugeordnet. An jeden Punkt einer Geraden des Prozesses wird weiterhin ein symmetrisches Wirkungsprofil (repräsentiert durch eine Funktion f) angeheftet. Überlagern sich die Wirkungsprofile verschiedener Geraden an einem Punkt, so wird das Maximum der entsprechenden Werte der Wirkungsprofile gebildet.

Sei also $\Psi_m = \{(l_i, m_i)\}$ ein markierter Geradenprozess mit messbarem Markenraum $[M, \mathfrak{M}]$ und $\Phi_m = \{((\alpha_i, p_i), m_i)\}$ der entsprechende Geraden-Punktprozess in $\mathcal{C}$. Der Abstand eines Punktes $\mathbf{x}$ der Ebene, gegeben in Polarkoordinaten $\mathbf{x} = (r, \varphi)$ mit $r \geq 0$ und $\varphi \in (0, 2\pi]$, zu einer Geraden l_i , gegeben in Koordinaten (α_i, p_i) des Parameterraums $\mathcal{C}$, ist:

$$d((r, \varphi), (\alpha_i, p_i)) = r \sin(\alpha_i - \varphi) - p_i,$$

d. h. $d : [0, \infty) \times (0, 2\pi] \times (0, \pi] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$.

Weiterhin sei die Profilkfunktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ gegeben.

Die Funktion $w : [0, \infty) \times (0, 2\pi] \times (0, \pi] \times \mathbb{R} \times M \rightarrow [0, \infty)$ ist nun als Verkettung von f und d definiert:

$$w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i) = f(d(r, \varphi, \alpha_i, p_i), m_i).$$

Die Funktion f sei analog der Konstruktion einer Booleschen Funktion (Serra, 1987) oberhalbstetig und fast sicher positiv mit kompakter Trägermenge.

Dann heißt das Zufallsfeld $\{Z_M(r, \varphi)\}$ mit

$$Z_M(r, \varphi) = \sup_{((\alpha_i, p_i), m_i) \in \Phi_m} w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i), \quad (r, \varphi) \in [0, \infty) \times (0, 2\pi] \quad (2.47)$$

Geraden-Maximum-Feld.

Ausgedrückt durch die Größen im $\mathbb{R}^2$ ergibt sich für das Geraden-Maximum-Feld folgende verkürzte Schreibweise:

$$Z_M(\mathbf{x}) = \sup_{(l_i, m_i) \in \Psi_m} f(d_1(\mathbf{x}, l_i), m_i), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

wobei d_1 eine Funktion ist, mit der der Abstand zwischen dem Punkt $\mathbf{x}$ und der Geraden l_i berechnet wird.

Eigenschaft Stationarität

Das in (2.47) definierte Geraden-Maximum-Feld ist genau dann stationär, wenn der zugrunde liegende Geradenprozess stationär ist. Wenn das Zufallsfeld $\{Z_M(\mathbf{x})\}$ stationär ist, genügt es für die Berechnung eindimensionaler Verteilungen, Betrachtungen im Nullpunkt $(0, 0) = o$, d. h. für $Z_M(o)$, durchzuführen (verkürzte Notation: $Z_M = Z_M(o)$). Der Abstand des Nullpunktes zu einer Geraden mit Parametern (α_i, p_i) ist $-p_i$ (laut Definition von p in (2.33)). Somit ergibt sich für $\mathbf{x} = (0, 0)$:

$$w(0, 0, \alpha_i, p_i, m_i) = f(-p_i, m_i).$$

Im Folgenden wird immer ein stationärer Geradenprozess vorausgesetzt, sodass bei der Berechnung der eindimensionalen Verteilungsfunktion mit $f(-p_i, m_i)$ anstelle von $w(r, \varphi, \alpha_i, p_i, m_i)$ gearbeitet wird.

Ist der zugrunde liegende Geradenprozess ein Poisson-Geradenprozess, dann spricht man von einem Poissonschen Geraden-Maximum-Feld. Abschnitt 2.3.2.2 und 2.3.2.3 sind auf diesen Fall beschränkt.

Oberhalbstetigkeit

Sei $f_k : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ eine reellwertige Funktion. f_k heißt *oberhalbstetig* (oder halbstetig von oben), wenn für jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ und jedes $e_n > f_k(\mathbf{x})$, $e_n \in \mathbb{R}$, eine Umgebung U von $\mathbf{x}$ existiert, sodass $f_k(\mathbf{y}) < e_n$ für alle $\mathbf{y}$ in U . Beispielsweise ist die Funktion f_k mit $f_k(x) = 0$ für $x < 0$ und $f_k(x) = 1$ für $x \geq 0$ oberhalbstetig.

Niveaumenge

Die Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ des Zufallsfeldes $\{Z_M\}$ zum Niveau e_n , $X_{e_n}(Z_M) \subseteq \mathbb{R}^2$, entspricht der Menge aller Punkte (x_1, x_2) , deren Funktionswert $Z_M(x_1, x_2)$ größer oder gleich dem fixierten Wert e_n ist:

$$X_{e_n}(Z_M) = \{(x_1, x_2) : Z_M(x_1, x_2) \geq e_n\}, \quad e_n \text{ fixiert.}$$

Ist Z_M eine oberhalbstetige Funktion, so sind die Mengen $X_{e_n}(Z_M)$ abgeschlossen und bei größer werdendem Niveau e_n monoton fallend (Serra, 1982, S. 426 ff.).

2.3.2.2 Eindimensionale Verteilungsfunktion, Erwartungswert und Varianz

Satz 2.3.4. *Sei $\{Z_M(r, \varphi)\}$ ein Geraden-Maximum-Feld, wobei Ψ_m ein markierter isotroper und stationärer Poisson-Geradenprozess mit Intensität L_A und Markenverteilung $\mathcal{M}$ ist. Weiterhin sei die Funktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow (0, \infty]$ oberhalbstetig und fast sicher positiv mit kompakter Trägermenge. Für die eindimensionale Verteilungsfunktion von $Z_M(r, \varphi)$ gilt für alle $m \in M$:*

$$F_{Z_M}(z) = P(Z_M < z) = \exp(-L_A [\mathbf{E}\nu(\{p : f(-p, m) \geq z\})]), \quad z \in \mathbb{R}. \quad (2.48)$$

Beweis. Durch Anwendung der Formel in Serra (1982), S. 471, vgl. (2.25), mit $B = \{o\}$, $\Theta d\alpha = \frac{L_A}{\pi} d\alpha$ und aufgrund der vorausgesetzten Isotropie des Geradenprozesses erhält man die Behauptung. $\square$

Erwartungswert und Varianz für das Geraden-Maximum-Feld können anhand der Gleichung (2.48) für die eindimensionale Verteilungsfunktion leicht berechnet werden.

Beispiel 2.3.3. *Die Marken m_i aller Geraden seien gleich, sodass f nur noch von p abhängig ist, vereinfachte Notation $g(p) := f(p, m)$. Tabelle 2.3 enthält für ausgewählte Wirkungsprofile die eindimensionale Verteilungsfunktion.*

Wirkungsprofil	$\mathbf{E}\nu(\{p : g(-p, m) \geq z\})$ $= E_z(g)$	$F_{Z_M}(z)$
Rechtecksfunktion $g(p) = \begin{cases} h, & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$E_z(g) = \begin{cases} 2a, & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$F(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \exp(-2L_A a), & 0 \leq z < h, \\ 1, & z \geq h. \end{cases}$
quadratische Funktion $g(p) = \begin{cases} h \cdot \left(1 - \frac{p^2}{a^2}\right), & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$E_z(g) = \begin{cases} 2a \sqrt{\frac{h-z}{h}}, & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$F(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \exp\left(-2L_A a \sqrt{\frac{h-z}{h}}\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 1, & z > h. \end{cases}$
Dreiecksfunktion $g(p) = \begin{cases} h \cdot \left(1 - \frac{ p }{a}\right), & -a \leq p \leq a, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$E_z(g) = \begin{cases} 2a \left(\frac{h-z}{h}\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$	$F(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \exp\left(-2L_A a \left(\frac{h-z}{h}\right)\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 1, & z > h. \end{cases}$

Tabelle 2.3: Eindimensionale Verteilungsfunktion für das Geraden-Maximum-Feld mit ausgewählten Wirkungsprofilen.

2.3.2.3 Weitere Formeln

Für die symmetrische Funktion f gilt: $f(-p, m) = f(p, m)$. Ist die Funktion f zusätzlich konvex, dann bilden die Niveaumengen eines Poissonschen Geraden-Maximum-Feldes Poisson-Streifenprozesse. Zur Charakterisierung der Niveaumengen können dann alle Formeln aus Kapitel 2.1.4 verwendet werden.

Satz 2.3.5. *Sei $\{Z_M(r, \varphi)\}$ ein Geraden-Maximum-Feld, wobei Ψ_m ein markierter isotroper und stationärer Poisson-Geradenprozess mit Intensität L_A und Markenverteilung $\mathcal{M}$ ist. Weiterhin sei die Funktion $f : \mathbb{R} \times M \rightarrow (0, \infty]$ oberhalbstetig und fast sicher positiv mit kompakter Trägermenge, konvex und es gelte $f(-p, m) = f(p, m)$. Dann bildet die Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ für jedes $e_n \in \mathbb{R}$ einen Poisson-Streifenprozess mit Liniendichte $L_A^{e_n} = L_A \cdot P(f(0, m) \geq e_n)$ und mittlerer Streifenbreite $2\mathbf{E}R^{e_n} = \mathbf{E}\nu(\{p : f(-p, m) \geq e_n\})$.*

Beweis. In der Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ erscheinen nicht zwingend alle Geraden des ursprünglichen Poisson-Geradenprozesses Ψ_m von Z_M . Es sind genau noch die Geraden l_i vorhanden, für die $f(0, m_i) \geq e_n$ gilt (da f laut Voraussetzung konvex und $f(-p, m) = f(p, m)$). Das heißt, der ursprüngliche Poisson-Geradenprozess wird ausgedünnt mit

Verbleibewahrscheinlichkeit $p(e_n) = P(f(0, m) \geq e_n)$. Eine Ausdünnung eines Poisson-Geradenprozesses mit Intensität λ ist wieder ein Poisson-Geradenprozess (mit Intensität $\lambda_p = \lambda \cdot p(e_n)$). Daher liegt der Menge $X_{e_n}(Z_M)$ ein Poisson-Geradenprozess $\Psi_m(e_n) = \{l_j : P(f(0, m_j) \geq e_n)\}$ mit Liniendichte $L_A^{e_n} = L_A \cdot P(f(0, m) \geq e_n)$ zugrunde.

Offensichtlich kann zur Beschreibung der Schnittmenge $X_{e_n}(Z_M)$ jede Gerade des verdünnten Poisson-Geradenprozesses $\Psi_m(e_n)$ abhängig vom Wirkungsprofil f mit einem Kreis mit zufälligem Radius R^{e_n} dilatiert werden, d. h.

$$X_{e_n}(Z_M) = \bigcup_{l_j \in \Psi_m(e_n)} l_j \oplus b(o, R_j^{e_n}),$$

wobei $R_j^{e_n}$ der zu l_j gehörende Kreisradius ist. Die Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ bildet also einen Poisson-Streifenprozess mit mittlerer halber Streifenbreite $\mathbf{E}R^{e_n}$.

Da f laut Voraussetzung konvex und symmetrisch ist, folgt für den mittleren Kreisdurchmesser/die mittlere Streifenbreite $2\mathbf{E}R^{e_n}$:

$$2\mathbf{E}R^{e_n} = \mathbf{E}\nu(\{p : f(-p, m) \geq e_n\})$$

woraus sich die Behauptung ergibt. □

Beispiel 2.3.4. *Im Folgenden wird für die Funktionen aus Beispiel 2.3.3 die Kovarianz der Niveaumengen zum Niveau $0 \leq e_n \leq h$ angegeben.*

Rechtecksfunktion:

$$C(r) = \begin{cases} 1 - 2 \exp(-2L_A a) + \exp\left(-2L_A \left(a + \frac{r}{\pi}\right)\right), & 0 \leq r \leq 2a, \\ 1 - 2 \exp(-2L_A a) + \exp\left(-2\frac{L_A}{\pi} \left(2a\pi + r - r\sqrt{1 - \frac{4a^2}{r^2}} - 2a \arcsin(2a/r)\right)\right), & r > 2a, \end{cases}$$

quadratische Funktion:

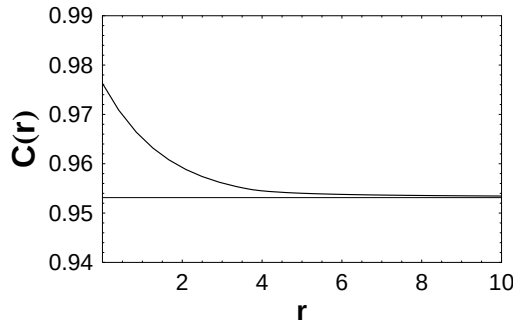
$$C(r) = \begin{cases} 1 - 2 \exp\left(-2L_A a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}\right) + \exp\left(-2\frac{L_A}{\pi} \left(r + \pi a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}\right)\right), & 0 \leq r \leq 2a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}, \\ 1 - 2 \exp\left(-2L_A a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}\right) + \exp\left(-2\frac{L_A}{\pi} \left(r - r\sqrt{1 - \frac{4a^2(h-e_n)}{hr^2}} + \right.\right. \\ \left.\left. + 2\pi a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}} - 2a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}} \arcsin\left(2a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}/r\right)\right)\right), & r > 2a \sqrt{\frac{h-e_n}{h}}, \end{cases}$$

Dreiecksfunktion:

$$C(r) = \begin{cases} 1 - 2 \exp\left(-2L_A a \frac{h-e_n}{h}\right) + \exp\left(-2L_A \left(r/\pi + a \frac{h-e_n}{h}\right)\right), & 0 \leq r \leq 2a \frac{h-e_n}{h}, \\ 1 - 2 \exp\left(-2L_A a \frac{h-e_n}{h}\right) + \exp\left(-4L_A a \frac{h-e_n}{h}\right) \cdot \exp\left(2 \frac{L_A}{\pi} (-r + \right. \\ \left. + r \sqrt{1 - \frac{4a^2(h-e_n)^2}{h^2 r^2}} + 2a \frac{h-e_n}{h} \arcsin\left(2a \frac{h-e_n}{h r}\right)\right), & r > 2a \frac{h-e_n}{h}. \end{cases}$$

Abbildung 2.17 zeigt je ein Beispiel für die Kovarianz $C(r)$ der Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ des Geraden-Maximum-Feldes $\{Z_M(r, \varphi)\}$ mit quadratischer Funktion und Dreiecksfunktion. Die Kovarianz im Falle einer Rechtecksfunktion wurde bereits beim Poisson-Streifenprozess in Abb. 2.1.1 dargestellt.

a)



b)

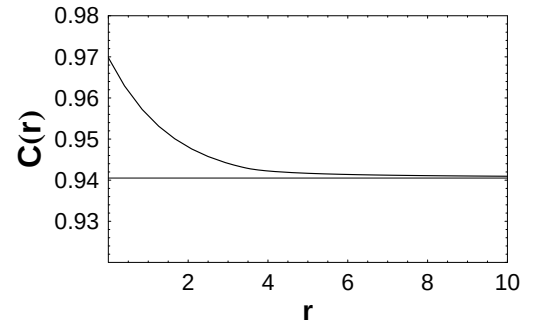


Abbildung 2.17: Kovarianz $C(r)$ der Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ des Poissonschen Geraden-Maximum-Feldes $\{Z_M(r, \varphi)\}$ mit a) quadratischer Funktion und b) Dreiecksfunktion, wobei $L_A = 1, a = 2, h = 4, e_n = 0, 5$.

2.4 Kombinationen aus zufälliger abgeschlossener Menge und aus Punktprozessen konstruierter Zufallsfelder

Zum Abschluss des Kapitels zu den mathematischen Grundlagen werden Kombinationen aus bereits dargestellten stochastischen Modellen betrachtet. Motiviert durch die mechanische Bearbeitung poröser Materialien wird durch Verknüpfung einer zufälligen abgeschlossenen Menge mit einer Booleschen Funktion im Rahmen dieser Arbeit ein neues Modell konstruiert. Für dieses hier erstmalig beschriebene Modell wird die Dichtefunktion hergeleitet. Das zweite kombinierte Modell, motiviert durch den Abtragsprozess beim CMP-Prozess, basiert auf der Verknüpfung des Booleschen Modells mit dem

Shot-Noise-Prozess. Dieses Modell ist unter dem Namen „Additives Boolesches Modell“ bekannt und bereits ausreichend beschrieben.

2.4.1 Zufällige abgeschlossene Menge und Boolesche Funktion

In diesem Abschnitt wird ein neues Modell zur Beschreibung rauer Oberflächen erarbeitet. Dabei wird eine stationäre zufällige abgeschlossene Menge (vgl. 2.1) mit einer Booleschen Funktion (vgl. 2.2.1) verknüpft. Eine zufällige abgeschlossene Menge wird häufig zur Beschreibung von porösen Materialstrukturen herangezogen. Die Boolesche Funktion ist eine bekannte Zufallsfunktion, die für die Charakterisierung rauer Oberflächen von nicht porösen Werkstoffen verwendet wird (vgl. Jeulin und Jeulin, 1981). Das hier neu entwickelte Modell ermöglicht es nun, die raue Oberfläche von porösen Werkstoffen zu charakterisieren. Als Kenngröße des neuen Modells wird eine Formel für die eindimensionale Dichtefunktion hergeleitet.

2.4.1.1 Definition

Das aus zufälliger abgeschlossener Menge und Boolescher Funktion konstruierte Zufallsfeld $\{Z_n^*(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d-1}$, ergibt sich folgendermaßen aus zwei Zufallsvariablen (siehe Abb. 2.18):

Sei Ξ eine stationäre zufällige abgeschlossene Menge des $\mathbb{R}^d$ mit Volumenanteil V_V und der linearen Kontaktverteilungsfunktion H_l . Sei weiterhin $\{Z_n(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{d-1}$, ein stationäres Zufallsfeld, wobei $Z_n(\mathbf{x})$ eine Boolesche Funktion ist. Dann ist $\{Z_n^*(\mathbf{x})\}$ mit

$$Z_n^*(\mathbf{x}) = \begin{cases} Z_n(\mathbf{x}), & (\mathbf{x}, Z_n(\mathbf{x})) \in \Xi, \\ Z_n(\mathbf{x}) + L(\mathbf{x}), & (\mathbf{x}, Z_n(\mathbf{x})) \notin \Xi, \end{cases} \quad (2.49)$$

wobei $L(\mathbf{x})$ die Restsehnenlänge in vertikaler Richtung in $\mathbf{x}$ mit Verteilung H_l (vgl. 2.1.1 und Abb. 2.2) bezeichnet, das aus zufälliger abgeschlossener Menge und Boolescher Funktion konstruierte Zufallsfeld.

Bemerkung: Da angenommen wird, dass sowohl Ξ als auch das Zufallsfeld $\{Z_n(\mathbf{x})\}$ stationär sind, ist auch $\{Z_n^*(\mathbf{x})\}$ stationär.

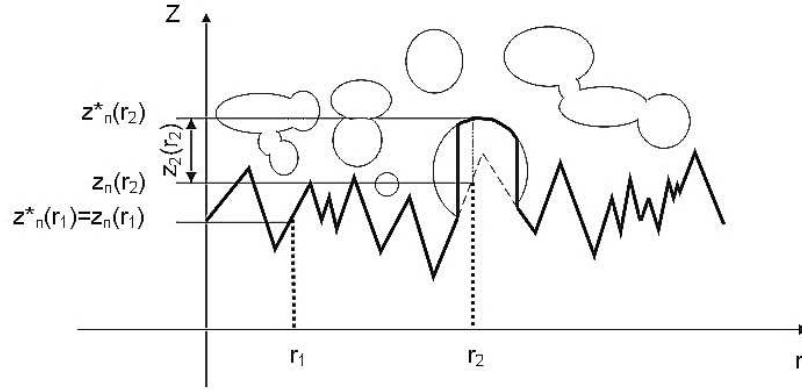


Abbildung 2.18: In dieser schematischen Darstellung hat die zufällige abgeschlossene Menge elliptische Poren. Die fett gedruckte Linie mit scharfen Zacken stellt den Wert der Booleschen Funktion $\{Z_n\}$ dar. Im Punkt r_1 ist $Z_n^*(r_1) = Z_n(r_1)$. Im Punkt r_2 trifft die Boolesche Funktion auf eine Pore. Somit ist $Z_n^*(r_2)$ die Summe aus Z_n und der Restsehnenlänge in vertikaler Richtung in der Pore (Wiegand und Stoyan, 2006b).

2.4.1.2 Eindimensionale Dichtefunktion

Die eindimensionale Dichtefunktion wird für den Fall angegeben und bewiesen, bei dem die Boolesche Funktion analog zum Beispiel 2.2.1 definiert und Ξ eine zweidimensionale Menge ist. Dieser Fall wird in Kapitel 3 benötigt. Eindimensionale Dichtefunktionen für andere Beispiele können analog hergeleitet werden.

Satz 2.4.1. Sei $\{Z_n^*(r)\}$, $r \in \mathbb{R}$, das in (2.49) definierte stationäre Zufallsfeld, wobei die Boolesche Funktion $Z_n(r)$ durch einen stationären Poisson-Prozess mit Intensität n und eine Dreiecksfunktion $f_B : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$, d. h.

$$f_B(r) = \begin{cases} h - \frac{h}{a}|r|, & -a \leq r \leq a, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

gegeben ist. Weiterhin sei $\Xi \subset \mathbb{R}^2$ eine zufällige abgeschlossene Menge mit Volumenanteil V_V und linearer Kontaktverteilungsfunktion H_l mit Parameter λ_2 . Dann gilt für die

eindimensionale Dichtefunktion des Zufallsfeldes $\{Z_n^*(r)\}$:

$$f_{Z_n^*}(z) = \begin{cases} \frac{\frac{n}{h}(1-V_V)\lambda_2}{\frac{n}{h}+\lambda_2} (\exp(\lambda_2(h-z)) - \exp(-n - \lambda_2 z)), & z > h, \\ V_V \frac{n}{h} \exp(\frac{n}{h}(z-h)) + \frac{\frac{n}{h}(1-V_V)\lambda_2}{\frac{n}{h}+\lambda_2} (\exp(\frac{n}{h}z - n) - \exp(-n - \lambda_2 z)), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & z < 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Beweis. Die Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ für das Zufallsfeld $\{Z_n^*(r)\}$ erhält man durch Überlagerung von Ergebnissen aus den Abschnitten 2.1.1 und 2.2.1.

Zunächst wird ein beliebiger Punkt $(r, Z_n(r))$ des Graphen der Booleschen Funktion betrachtet. Laut Definition ist $Z_n^*(r) = Z_n(r)$, wenn $(r, Z_n(r)) \in \Xi$. Die Dichtefunktion von $\{Z_n(r)\}$ ist (vgl. Formel (2.31)):

$$f_n(z) = \begin{cases} \frac{n}{h} \exp\left(\frac{n}{h}(z-h)\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass der Punkt $(r, Z_n(r))$ zur Menge Ξ gehört, ist aufgrund der gegebenen Stationarität gleich V_V . Mit Wahrscheinlichkeit $1 - V_V$ wird ein zusätzlicher Wert L in r addiert, wobei L die positive Restsehnenlänge in vertikale Richtung mit Verteilungsfunktion H_l ist. Der Wert Z_n^* ergibt sich also aus der Summe von zwei Zufallsvariablen mit Dichtefunktionen $f_n(z)$ und $g_L(z)$ mit

$$g_L(z) = \begin{cases} V_V \delta(z) + (1 - V_V) h_l(z), & z \geq h, \\ 0, & z < 0, \end{cases}$$

$$\delta(z) \text{ Deltafunktion und } h_l(z) = \lambda_2 \exp(-\lambda_2 z).$$

Die Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ von Z_n^* erhält man schließlich durch Faltung $(*)$ von $f_n(z)$

und $g_L(z)$:

$$\begin{aligned}
 f_{Z_n^*}(z) &= (f_n * g_L)(z) \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} f_n(y) g_L(z - y) dy \\
 &= \int_0^h \frac{n}{h} e^{\frac{n}{h}(y-h)} g_L(z - y) dy \\
 &= \begin{cases} \int_0^h \frac{n}{h} e^{\frac{n}{h}(y-h)} (V_V \delta(z - y) + (1 - V_V) \lambda_2 e^{-\lambda_2(z-y)}) dy, & z > h, \\ \int_0^z \frac{n}{h} e^{\frac{n}{h}(y-h)} (V_V \delta(z - y) + (1 - V_V) \lambda_2 e^{-\lambda_2(z-y)}) dy, & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \\
 &= \begin{cases} \int_0^h \frac{n}{h} (1 - V_V) \lambda_2 e^{(\frac{n}{h} + \lambda_2)y - n - \lambda_2 z} dy, & z > h, \\ V_V \frac{n}{h} e^{\frac{n}{h}(z-h)} + \lambda_2 \int_0^z \frac{n}{h} (1 - V_V) e^{(\frac{n}{h} + \lambda_2)y - n - \lambda_2 z} dy, & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \\
 &= \begin{cases} \frac{\frac{n}{h}(1 - V_V) \lambda_2}{\frac{n}{h} + \lambda_2} e^{(\frac{n}{h} + \lambda_2)y - n - \lambda_2 z} \Big|_0^h, & z > h, \\ V_V \frac{n}{h} e^{\frac{n}{h}(z-h)} + \frac{\frac{n}{h}(1 - V_V) \lambda_2}{\frac{n}{h} + \lambda_2} e^{(\frac{n}{h} + \lambda_2)y - n - \lambda_2 z} \Big|_0^z, & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & z < 0. \end{cases}
 \end{aligned}$$

□

Abbildung 2.19 zeigt die Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ für ein Zufallsfeld $\{Z_n^*\}$ mit den Parametern $n = 6$, $h = 5$, $V_V = 0,4$ und $\lambda_2 = 0,4$.

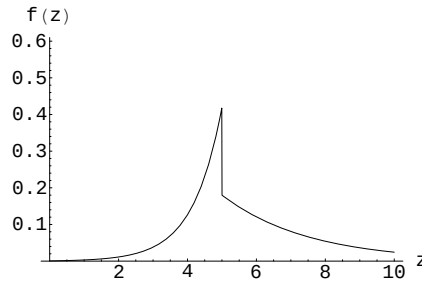


Abbildung 2.19: Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ mit $n = 6$, $h = 5$, $V_V = 0,4$, $\lambda_2 = 0,4$.

2.4.2 Das Additive Boolesche Modell — Boolesches Modell und Shot-Noise-Prozess

Das sogenannte Additive Boolesche Modell ist ein Zufallsfeld, das aus einer Kombination des Booleschen Modells (vgl. Kapitel 2.1.2) mit dem Shot-Noise-Prinzip (vgl. Kapitel 2.2.2) entsteht. Grob formuliert, werden beim Additiven Booleschen Modell die Einzelmengen nicht vereinigt, sondern additiv überlagert. Grundlagen zu diesem Modell sind in Schlather (1999) und Lantu  joul (2002) zu finden. Da das Additive Boolesche Modell zur Beschreibung des Abtragsprozesses beim CMP geeignet ist, werden hier in Anlehnung an Schlather (1999) wichtige Kenngr   en kurz dargestellt. Es wird dabei lediglich der $\mathbb{R}^2$ betrachtet.

2.4.2.1 Definition

Das Additive Boolesche Modell wird aus drei Elementen konstruiert:

- (1) aus einem station  ren und isotropen Poisson-Prozess $\Phi = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots\}$ im $\mathbb{R}^2$ mit Intensit  t λ ,
 - (2) aus einer Sequenz von unabh  ngigen, zuf  lligen kompakten Mengen $\Xi_1, \Xi_2, \dots$ des $\mathbb{R}^2$, die unabh  ngig vom Poisson-Prozess Φ sind; jede Menge Ξ_i hat die gleiche Verteilung wie eine kompakte zuf  llige Referenzmenge Ξ_0 mit endlichem mittlerem Fl  cheninhalt und
 - (3) einem Gewichtungsfaktor $k \in \mathbb{R}$.
- (Elemente 1 und 2 sind die Elemente eines Booleschen Modells.)

Das Zufallsfeld $\{Z_{AB}(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, mit

$$Z_{AB}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}_i \in \Phi} k \cdot \mathbf{1}_{(\Xi_i + \mathbf{x}_i)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2 \quad (2.51)$$

he   t *Additives Boolesches Modell*.

Wird anstelle der zuf  lligen Mengen $\{\Xi_i\}$ eine deterministische kompakte Menge K betrachtet, so kann (2.51) auch wie folgt geschrieben werden:

$$Z_{AB}(\mathbf{x}) = k \cdot \sharp(\Phi \cap (K + \mathbf{x})),$$

wobei $\sharp(\Phi \cap (K + \mathbf{x}))$ die Anzahl der Punkte des station  ren Poisson-Prozesses Φ in der um den Vektor $\mathbf{x}$ verschobenen Menge K (kurz: $K + \mathbf{x}$) bezeichnet. Das Additive

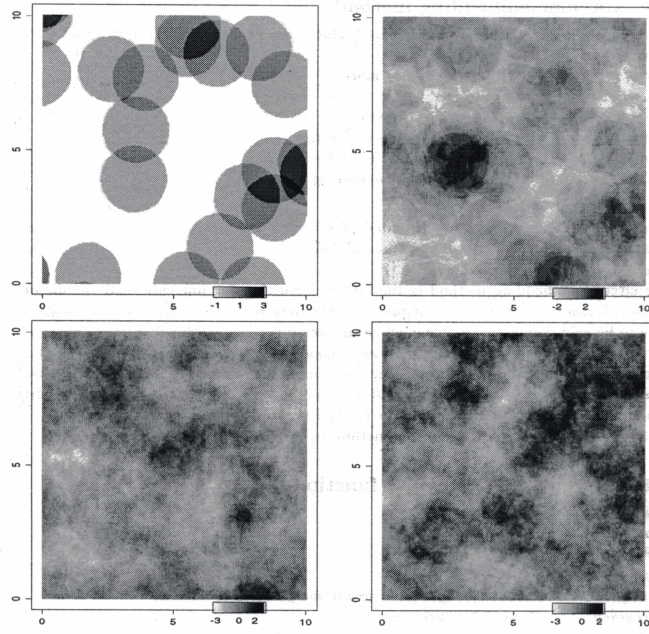


Abbildung 2.20: Simulationen von Additiven Booleschen Modellen mit Kreisen. Rezentrierte und renormalisierte Überlagerungen von einer, zehn, 100, 1000 Simulationen eines Additiven Booleschen Modells mit Radius $r = 5/4$. Die Intensität beträgt links oben $\lambda = 16/(25\pi)$, rechts oben $\lambda = 160/(25\pi)$, links unten $\lambda = 1600/(25\pi)$ und rechts unten $\lambda = 16000/(25\pi)$ (Schlather, 1999).

Boolesche Modell $Z_{AB}(\mathbf{x})$ zählt dann also, bis auf einen Faktor k , die Punkte von Φ innerhalb der verschobenen kompakten Menge $K + \mathbf{x}$.

Abbildung 2.20 aus Schlather (1999) zeigt Simulationen eines Additiven Booleschen Modells mit Kreisen, wobei unterschiedliche Intensitäten λ verwendet wurden.

2.4.2.2 Kenngrößen

Für den Erwartungswert und die Varianz des Additiven Booleschen Modells gilt:

$$\mathbf{E}Z_{AB}(\mathbf{x}) = k \cdot \lambda \cdot \mathbf{E}\nu_2(\Xi_0). \quad (2.52)$$

$$\mathbf{var}Z_{AB}(\mathbf{x}) = k^2 \cdot \lambda \cdot \mathbf{E}\nu_2(\Xi_0). \quad (2.53)$$

Da Φ ein stationärer und isotroper Poisson-Prozess mit Intensität λ ist, ist die Anzahl der Punkte von Φ in $\Xi_0 + \mathbf{x}$ Poisson-verteilt mit dem Parameter $\epsilon = \lambda \cdot \mathbf{E}\nu_2(\Xi_0)$. Der

Erwartungswert und die Varianz einer Poisson-Verteilung sind gleich dem Parameter ϵ (Stoyan, 1993).

Die Kovarianzfunktion $C(\mathbf{x})$ eines Additiven Booleschen Modells ist in Schlather (1999), S. 31, angegeben. Die Randverteilungen dieses Zufallsfeldes folgen einer Poisson-Verteilung.

3 Der Prozess des chemisch-mechanischen Polierens von Wafern

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Modellierung des chemisch-mechanischen Polierprozesses von Wafern. Es werden dazu im Kapitel 2 beschriebene und teilweise neu bzw. weiter entwickelte stochastische Modelle verwendet und in die Praxis überführt.

Nach einer allgemeinen Prozessbeschreibung mit einer Bewertung vorhandener Modelle werden die Einflussfaktoren und sich daraus ergebende offene Grundprobleme sowie die Themenstellung der Dissertation dargestellt. Als einer der wesentlichen Einflussfaktoren wird in dieser Arbeit das Polierruch und seine Oberfläche modelliert. Dabei soll erstmals ein Parameter aufgezeigt werden, durch den ein ideales Polierruch charakterisierbar wird. Die theoretischen Erkenntnisse zur Beschaffenheit einer idealen Tuchoberfläche werden anhand experimenteller Daten verifiziert.

Ein weiterer Hauptpunkt dieses Kapitels ist die Modellierung des Abtragsprozesses, wobei der Schwerpunkt auf dem Einfluss der Tuchoberfläche liegt. Dabei wird ein bereits in der Literatur zu findender Weg und ein in dieser Arbeit vorgestellter neuer Ansatz verfolgt. Ein Vergleich der Modelle mit experimentellen Ergebnissen zeigt die Überlegenheit des neuen Ansatzes. Es können nun erstmalig Zusammenhänge zwischen Ebenheit der Waferoberfläche und Tuchrauheit bzw. anderen Prozessparametern durch eine Theorie begründet werden, die nach Ansicht der Autorin großes Potenzial für weitere Verfeinerungen liefert.

3.1 Beschreibung des chemisch-mechanischen Polierprozesses

Dieses Kapitel beschreibt zunächst makroskopisch den chemisch-mechanischen Polierprozess. Danach wird ein zusätzlich eingeführter Prozessschritt, das Konditionieren der Tuchoberfläche, erläutert und die wichtigsten Einflussfaktoren aufgezählt. Ein Einblick in bereits existierende Modelle zeigt die Vielfältigkeit der Theorien zur mikroskopischen Beschreibung des Abtragsprozesses. Resultierend aus dieser Modellbetrachtung und der Erfahrung in der Praxis ergeben sich offene Grundprobleme und die Themenstellung dieser Dissertation.

3.1.1 Der Prozess

Die Technologie des chemisch-mechanischen Polierens wurde für die schnelle Planarisierung, d. h. die schnelle Reduzierung kleinster Erhöhungen auf der Waferoberfläche entwickelt. Wichtige Bewertungskriterien für die Effizienz des Prozesses sind Ebenheit der polierten Waferoberfläche und mittlere Abtragsrate.

Der Prozess läuft makroskopisch wie folgt ab: Ein rotierender Wafer wird gegen ein rotierendes Poliertuch gedrückt. Gleichzeitig wird eine chemisch reaktive Flüssigkeit mit Partikeln (Slurry) zwischen Tuch und Wafer eingebracht. Die Kombination aus Tuch, Slurry, Druck, Temperatur, Tuch- und Waferrotation bewirkt den Oberflächenabtrag und eine Planarisierung.

3.1.2 Das Konditionieren der Tuchoberfläche

Werden viele Wafer nacheinander mit demselben Tuch poliert, nimmt die mittlere Abtragsrate deutlich ab (siehe Bajaj, 1994). Dies wird prozessbedingt durch eine Glättung der Tuchoberfläche hervorgerufen. Um die Abtragsrate stabil auf hohem Niveau zu halten, muss die Rauheit des Tuches erhalten werden (wenn im Rahmen dieser Arbeit von Tuchrauheit gesprochen wird, so meint dies lokale Höhenunterschiede in der Tuchstruktur). Zu diesem Zweck wird ein zusätzlicher Prozess im chemisch-mechanischen Polieren

eingesetzt: das Konditionieren der Tuchoberfläche.

Beim Konditionieren eines Poliertuches findet eine kreisförmige Platte Verwendung, die mit Diamanten, Borsten o. ä. (den Schnittlelementen) besetzt ist. Diese Platte (Konditionierer) wird in Rotation versetzt und mit einem bestimmten Druck über das Tuch bewegt. Dabei rauhen/frischen die Schnittlelemente die Tuchoberfläche auf und reinigen sie.

Das Konditionieren kann gleichzeitig zur Waferpolitur („in-situ“) oder zwischen zwei Waferpolierfahrten („ex-situ“) durchgeführt werden.

3.1.3 Einflussparameter

Wichtige Einflussparameter auf den CMP-Prozess sind:

- das Tuch, charakterisierbar durch Parameter wie Porosität, Rauheit der Oberfläche, Härte, E-Modul, Poissonzahl, Kompressibilität u. a.
- das Slurry, charakterisierbar durch Konzentration, Größenverteilung und Form der Partikel
- die Slurry-Fließgeschwindigkeit und die verwendeten Chemikalien (chemische Reaktivität)
- der ausgeübte Druck
- die Relativgeschwindigkeit, mit der sich ein Punkt auf dem Wafer während des Polierprozesses bewegt; ergibt sich aus der Rotationsgeschwindigkeit des Poliertuches und der Rotationsgeschwindigkeit des Wafers
- die Temperatur
- die Eingangsunebenheit des Wafers.

3.1.4 Bereits existierende Modelle

Über die mikroskopische Wirkungsweise der den Abtrag hervorruhenden Kombination aus den obigen Einflussparametern gibt es in der Fachliteratur sehr unterschiedliche

Theorien und Modelle. G. Nanzs und L. E. Camillettis Artikel „Modeling of chemical-mechanical polishing: A review“ (1995) gibt einen sehr guten Überblick über wichtige Modelle vor 1995 und deren Vor- bzw. Nachteile. Hier sollen nicht noch einmal alle verschiedenen Theorien wiederholt, sondern nur drei wichtige Ansätze mit weiterführenden Arbeiten nach 1995 herausgestellt werden:

Eine Hypothese ist, dass der Abtrag beim CMP durch Erosion aufgrund des *Slurry-Flusses* zwischen Wafer und Tuch hervorgerufen wird. Es wird dabei angenommen, dass mit dessen Strömung Partikel aus der Waferoberfläche „herausgerissen“ werden. Begriffe wie hydrodynamischer Kontakt, Lubrikationstheorie sowie Reynolds-Gleichung tauchen in diesem Zusammenhang auf. In Sundararajan u. a. (1999) ist z. B. ein Lubrikationsmodell für den Slurry-Fluss und ein Modell zum Materialtransport zu finden, das die chemische Reaktion an der Waferoberfläche, die Hydrodynamik des Slurry-Flusses und die Anwesenheit von abtragenden Partikeln betrachtet. Mit dem Modell von Thakurta u. a. (2001), das die Tuchporosität und -krümmung einschließt, wird u. a. die Dicke des Slurry-Filmes zwischen Wafer und Tuch berechnet. Es basiert auf einer verallgemeinerten Reynolds-Gleichung. Mit der Vorhersage dieser Filmdicke beschäftigen sich auch Jeng und Tsai (2003), die den Einfluss verschiedenartigster Prozessbedingungen auf die Dicke des Slurry-Filmes analysieren.

Eine weitere Hypothese ist, dass der Materialabtrag hauptsächlich mechanisch hervorgerufen wird. Der chemische Beitrag wird lediglich durch einen „dynamischen“ Härteparameter für die abzutragende Waferoberfläche modelliert. Es wird dabei angenommen, dass ein Partikel durch das Tuch über die Waferoberfläche „geschliffen“ wird und eine Art „Mikrofurche“ auf der Waferoberfläche hinterlässt. Für die Berechnung der Tiefe und der Breite der Mikrofurche wird die Theorie der Kontaktmechanik (Johnson, 1985) angewendet. Hier sind z. B. die Arbeiten von Luo und Dornfeld (2001), Vlassek (2004) und Jeng und Huang (2005) einzuordnen. Luo und Dornfeld (2001) betonen den durch diesen Ansatz hervortretenden und in ihren Versuchen bestätigten nichtlinearen Zusammenhang zwischen Abtragsrate und Druck. Vlassek (2004) konzentriert sich u. a. auf die Problematik der Politur in Übergangsbereichen unterschiedlich harter Materialien (Chipindustrie). Jeng und Huang (2005) betrachten für die Theorie des mechanischen Abtrags einen verallgemeinerten Ansatz für die Kontaktfläche zwischen rauer Tuchoberfläche und Wafer. Lai (2001) untersucht in seiner Dissertation die folgenden Abtragsmechanismen für den CMP-Prozess: „surface melting“, „brittle fracture“, „burnishing“ und „plastic deformation“. Aus seinen experimentellen Untersuchungen schlussfolgert er, dass der vorherrschende Abtragsmechanismus beim CMP der durch den plastischen

Kontakt zwischen Partikel und Wafer hervorgerufene mechanische Abtrag ist.

In einer weiteren Modellgruppe wird angenommen, dass der Abtrag linear vom Druck und der Relativgeschwindigkeit abhängt. Weitere Einflussfaktoren wie Tuch und Slurry werden in einer Konstanten zusammengefasst. Preston (1927) hat aufgrund empirischer Erfahrungen bereits 1927 den Abtrag beim Polieren von Glasflächen mit folgender Gleichung beschrieben:

$$M_r = k_p q_0 v,$$

M_r	...	Materialabtragsrate $[\frac{\mu m}{s}]$
k_p	...	eine Konstante, die andere beteiligte Medien/Einflussfaktoren enthält $[\frac{\mu m^2}{N}]$
q_0	...	auf der zu polierenden Oberfläche anliegender Druck $[\frac{N}{\mu m^2}]$
v	...	Relativgeschwindigkeit der zu polierenden Oberfläche zum Poliertuch $[\frac{\mu m}{s}]$.

Heutige Anforderungen an das Polieren von Wafern machen es jedoch erforderlich, die in der Konstanten k_p zusammengefassten Einflüsse detaillierter zu modellieren und zu verstehen. Es seien beispielhaft zwei Phänomene genannt, die bisher mit der Preston-Gleichung nicht erklärt werden können: veränderte Abtragsrate beim Polieren mit unterschiedlichen Tüchern; Abnahme der Abtragsrate beim Polieren ohne Konditionierung der Tuchoberfläche. Es wird also ein Modell benötigt, in dem Tuchparameter explizit erfasst sind und nicht nur auf die Prozessparameter Druck und Relativgeschwindigkeit eingegangen wird. In Borucki (2002) wird beispielsweise die Preston-Gleichung hinsichtlich des Einflusses der Tuchoberfläche verfeinert.

Des Weiteren existieren Modelle, die auf einer Kombination aus den oben genannten Hypothesen beruhen. Beispielsweise wird in Tichy u. a. (1999) eine Kombination aus der Lubrikationstheorie und dem kontaktmechanischen Zugang zur Beschreibung des CMP-Abtragsprozesses dargestellt. Zhao und Chang (2002) erhalten durch Verwendung des kontaktmechanischen Zugangs eine Verfeinerung der Preston-Gleichung, bei der z. B. Slurry-Parameter explizit erfasst sind. Zhuang u. a. (2006) verwenden für ihre Untersuchungen ein 2-Schritt-Langmuir-Hinshelwood-Abtragsmodell, bei dem zwischen einer chemischen und einer mechanischen Abtragsrate unterschieden wird. Die mechanische Komponente wird dabei mit der Preston-Gleichung modelliert, wobei auch hier die Konstante weiter in Tuchparameter und andere Faktoren zerlegt wurde.

Es ist bekannt, dass der Polierprozess u. a. sehr stark vom Tuch bestimmt wird. Aufgrund dieser Wichtigkeit konzentrieren sich viele Artikel speziell auf das Tuch. In Yu

u. a. (1993) wird eine statistische Beschreibung der Tuchrauheit dargestellt, wobei auch die Wechselwirkung zwischen Tuch und Wafer eine Rolle spielt. Die Tuchentwicklung während des Polierprozesses wird dagegen in Yu u. a. (1993) nicht betrachtet. In Bajaj (1994) wird nun dieses Problem experimentell untersucht: Tücher werden mit unterschiedlichen Polierbedingungen prozessiert und verschiedene Tücher mit gleichen Polierbedingungen. Als Ergebnis zeigt sich, dass Tücher mit größerem Porenvolumen höhere anfängliche Abtragsraten haben. Des Weiteren wird mit dem Fortschreiten der Polierzeit eine Abnahme der Anzahl offener Poren beobachtet, die mit der Abnahme der Abtragsrate in Verbindung gebracht wird (Bajaj, 1994). Um den Abfall der Polierrate zu reduzieren, müssen daher geschlossene Poren wieder geöffnet werden. So wurde ein zusätzlicher Prozessschritt beim CMP eingeführt: das Konditionieren (vgl. Kapitel 3.1.2). Dabei wird ein Konditionierer (eine rotierende Platte, die mit Konditionierelementen besetzt ist, z. B. Diamanten) ebenfalls auf das Tuch gedrückt, um die Rauheit des Tuches zu erhalten und das Tuch zu reinigen; während des Polierens erzeugte glatte Gebiete auf der Tuchoberfläche werden so aufgebrochen und das Volumen offener Poren wieder erhöht. Um eine gleichmäßige Polierperformance zu erhalten, sollte die Intensität des Konditionierens für alle Punkte des Tuches gleich sein, wie von Hooper u. a. (2002) betont.

3.1.5 Offene Grundprobleme und Motivation dieser Arbeit

Bei den oben genannten Modellen und Ergebnissen bleiben einige weiterführende Fragestellungen unbeantwortet. Welchen Zusammenhang gibt es beispielsweise zwischen den Konditionierparametern und der für den Polierprozess so wichtigen resultierenden Tuchoberfläche? Als Basis für weitere Optimierungen des Polierprozesses wird hier ein Modell benötigt, das Tuch- und Konditionierparameter sowie deren Einfluss auf die resultierende Tuchoberfläche beschreibt. Borucki u. a. (2004) entwickelten ein mathematisches Modell für die Konditionierung und den Abtrag von Poliertüchern ohne Poren und stellten erste Schritte auch für Tücher mit Poren dar. Aufbauend auf diesem Modell sollen in dieser Dissertation die in der Industrie verwendeten porösen Tücher weiterführend untersucht und modelliert werden. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Rauheit der Poliertuchoberfläche und der Porosität des Tuches. Auf die physikalischen Parameter Härte, E-Modul, Poissonzahl und Kompressibilität wird nicht näher eingegangen. Sie stehen in Wechselwirkung mit der Porosität und der Rauheit des Tuches, was experimentell nur am Rande betrachtet wird.

Mit diesem Modell sollen sodann Ansätze zur Beantwortung der bisher ungeklärten Frage „Was macht ein ideales Poliertuch aus?“ geliefert werden. Ideales Poliertuch bedeutet hier geringe Unebenheit (Nanometerbereich) der polierten Waferoberfläche bei konstant hoher Abtragsrate. Es sollen Parameter herausgearbeitet werden, an denen die Güte von Poliertüchern gemessen werden kann. Die Aussagen müssen sich experimentell bestätigen lassen. Damit wird letztlich die Grundlage geschaffen, anhand der erkannten Parameter neue, bessere Poliertücher zu designen.

Des Weiteren wird in der Industrie eine Abhängigkeit zwischen Tuch und Ebenheit der polierten Waferoberfläche beobachtet, die zur Zeit mit keinem Modell erklärbar ist. Neue Tücher benötigen häufig einige Polierfahrten, bevor eine akzeptable Waferqualität erreicht wird (sogenanntes „break-in-behaviour“ von Tüchern). Es soll in dieser Arbeit ein Abtragsmodell entwickelt werden, das den Einfluss der Tuchoberfläche auf die Ebenheit der Waferoberfläche darstellt. Die existierenden Modelle, die in Kapitel 3.1.4 beschrieben wurden, beschränken sich bisher alle auf die mittlere Abtragsrate. Durch die stochastische Modellierung soll es möglich werden, auch die Varianz der Abtragsrate bzw. die Ebenheit der polierten Waferoberfläche zu beschreiben.

Nach dem Ansatz des „Slurry-Flusses“ wäre es möglich, mit einem sehr glatten Tuch gut zu polieren. Dies ist jedoch laut Bajaj (1994) und nach Erfahrungen in der Praxis nicht möglich. Aufgrund dieses Widerspruches wird die „Slurry-Fluss“-Hypothese hier nicht weiter verfolgt. Dagegen werden sowohl der kontaktmechanische Ansatz als auch die Preston-Gleichung bei der Modellierung betrachtet und verifiziert.

Wie der Name „chemisch-mechanisches Polieren“ bereits erkennen lässt, gibt es im Prozess eine chemische und eine mechanische Komponente. Die chemische Komponente wird als das Herabsetzen/Aufheben der Teilchenbindungen im oberflächennahen Bereich verstanden (vgl. z. B. Zhao und Chang, 2002). Gleichzeitig findet ein mechanischer Abtrag statt, der häufig wie folgt interpretiert wird: Die den Wafer berührenden Tucherhöhungen tragen Partikel und „schleifen“ sie über die Waferoberfläche (vgl. Luo und Dornfeld, 2001). Das Polierergebnis ist nun jedoch mehr als die Summe des chemischen und mechanischen Abtrags, wie er oben interpretiert wurde. Dies zeigen sehr anschaulich die Ergebnisse eines Laborversuchs, vgl. Tabelle 3.1 (Rurländer, 2005).

Die Wechselwirkung zwischen Chemie und Mechanik im Prozess ist nach wie vor noch nicht bis ins letzte Detail erforscht. Ein abschließender Erklärungsversuch ginge jedoch über das Ziel der vorliegenden Arbeit hinaus. Ein verifiziertes Abtragsmodell kann jedoch

Versuch	Abtragskomponente	Versuchsbedingungen	erzielte Abtragsrate
1	chemischer Abtrag (Ätzen mit Lauge)	Laugenlösung aus n Komponenten mit entsprechenden Kon- zentrationen; 25°C	$\ll 0,1 \mu\text{m}/\text{min}$
2	mechanischer Abtrag (Abrasion mit Kieselsol)	Kieselsollösung mit Kon- zentration A; 25°C	$\sim 2 \mu\text{m}/\text{min}$
3	chemisch-mechanischer Abtrag (Kombination)	Laugenlösung analog Versuch 1 zuzüglich Kieselsollösung analog Versuch 2; 25°C	$> 8 \mu\text{m}/\text{min}$

Tabelle 3.1: Ergebnisse des Laborversuchs zur Abgrenzung der chemischen und der mechanischen Abtragskomponente beim CMP. Exakte Lösungszusammensetzungen können aus Geheimhaltungsgründen nicht angegeben werden; sie liegen der Siltronic AG vor.

neue Ansätze zum besseren Verständnis liefern.

3.2 Poliertücher und ihre Oberfläche

Neben der chemischen Komponente ist das Poliertuch der wesentlichste Einflussfaktor beim chemisch-mechanischen Polieren. Wie bereits im Kapitel 3.1.5 beschrieben, ist die Wirkungsweise des Tuches noch nicht vollständig erforscht bzw. verstanden. Insbesondere die Frage nach dem Zusammenhang zwischen Konditionierparametern und resultierender Tuchoberfläche sowie nach messbaren Kriterien für ideale Poliertücher ist unbeantwortet.

In diesem Kapitel werden nun einige der im Kapitel 2 aufgezeigten stochastischen Modelle auf Poliertücher angewendet, um Ansätze zur Beantwortung obiger Fragen zu liefern. Als erstes werden mithilfe bekannter stochastischer Modelle die Struktur des Poliertuches und das Konditionieren beschrieben. Das daraus kombinierte Modell für die *konditionierte* Tuchoberfläche wurde in Kapitel 2 neu entwickelt. Dabei wurde auf der Arbeit von Borucki u. a. (2004) aufgebaut, in der erste Schritte für eine solche Modellierung zu finden sind. Die Modelle werden anhand experimenteller Ergebnisse verifiziert, wo-

bei insbesondere verschiedene Messmethoden der Oberflächenrauheit evaluiert werden mussten.

Mithilfe des in dieser Arbeit entwickelten und verifizierten stochastischen Modells zur Beschreibung der konditionierten Tuchoberfläche werden neue Erkenntnisse zum Zusammenhang zwischen Konditionierparametern/Tuchstrukturparametern und der resultierenden Tuchoberfläche dargestellt. Erstmals werden Parameter benannt, mit denen die Güte eines Tuches beurteilt werden kann bzw. welche Kriterien ein ideales Tuch erfüllen muss. Ideen zur Konstruktion, Herstellung und Erhaltung einer idealen Tuchoberfläche bilden den Abschluss dieses Kapitels.

3.2.1 Stochastische Modelle

In diesem Kapitel wird die stochastische Modellierung des Poliertuches, des Konditionierens und der konditionierten Tuchoberfläche beschrieben. Dabei wird erstmalig die Theorie der zufälligen abgeschlossenen Mengen auf Poliertücher angewendet. Das Konditionieren wird hier auf andere Weise wie in Borucki u. a. (2004) modelliert, wodurch erstmalig eine Verallgemeinerung des Modells leicht möglich wird. Die Grundideen von Borucki u. a. (2004) bleiben jedoch erhalten. Für die konditionierte Tuchoberfläche wird daraus resultierend eine Formel entwickelt, die die Variabilität der Oberfläche eines konditionierten Tuches mit Poren nach einer bestimmten Zeit beschreibt, wobei sowohl Tuch- als auch Konditioniereigenschaften einbezogen werden. Die Ergebnisse sind bereits in Wiegand und Stoyan (2006b) veröffentlicht worden und waren auch Bestandteil der Tagung „Freiberger Siliciumtage“ 2006 mit dem Tagungsbeitrag Wiegand und Stoyan (2006a).

3.2.1.1 Beschreibung des Poliertuches mithilfe zufälliger abgeschlossener Mengen

Poliertücher, die in der Industrie eingesetzt werden, sind im Allgemeinen porös, d. h. es liegt ein 2-Phasen-Medium mit einer festen und einer leeren Phase vor.

Die feste Phase des Tuches wird hier nun durch eine zufällige abgeschlossene Menge Ξ modelliert, die als stationär angenommen wird (siehe Kapitel 2.1.1). Die angenommene Stationarität bedeutet einfach, dass die Menge Ξ unendlich auf den gesamten Raum

erweitert wird, wobei überall gleiche zufällige Schwankungen auftreten.

Zur Charakterisierung einer zufälligen abgeschlossenen Menge werden u. a. zwei Parameter angegeben: der Volumenanteil V_V und die lineare Kontaktverteilungsfunktion mit dem Parameter λ_2 (zu Definitionen siehe Kapitel 2.1.1). Demzufolge kann auch die Struktur des Tuches mit den Parametern V_V und λ_2 charakterisiert werden. Im hier gegebenen Fall entspricht dann $1 - V_V$ der Porosität des Tuches.

Es können auch spezielle bekannte Modelle einer zufälligen abgeschlossenen Menge, z. B. das Boolesche Modell (vgl. 2.1.2), zur Beschreibung eines Poliertuches verwendet werden. Das Boolesche Modell für die feste Phase des Tuches anzuwenden, ist allerdings nicht praktikabel, da bei diesem Modell die feste Phase als Vereinigung vieler kleinerer Objekte betrachtet werden würde. Vielmehr entspricht die Menge der Poren der Vereinigung vieler kleinerer Objekte und somit dem Booleschen Modell. Dann ist die feste Phase gerade die abgeschlossene Hülle des Komplementes des Booleschen Modells. Ramírez und Rider (2003) verwendeten letzteres Modell zur Beschreibung der Tuchstruktur. Sie wurden dabei mit dem Problem konfrontiert, eine Formel für die entsprechende lineare Kontaktverteilungsfunktion entwickeln zu müssen. Die Berechnung der linearen Kontaktverteilungsfunktion für das Komplement des Booleschen Modells ist jedoch sehr schwierig (vgl. dazu 2.1.2). Gemäß den Ausführungen in Kapitel 2.1.1 kann aber für beide Anwendungen des Booleschen Modells und für viele andere zufällige abgeschlossene Mengen für die lineare Kontaktverteilungsfunktion eine Exponentialverteilung angenommen werden.

3.2.1.2 Beschreibung des Konditionierprozesses mithilfe der Booleschen Funktion

Grundlegende Annahmen

Die Tuchoberfläche wird als homogenes (stationäres) und ergodisches Zufallsfeld $\{Z_n(\mathbf{x})\}$ modelliert, wobei $\mathbf{x}$ die Position auf der Tuchoberfläche (in Polarkoordinaten $\mathbf{x} = (r, \varphi)$ mit $0 \leq r \leq r_{Tuch}$ und $0 \leq \varphi \leq 2\pi$) darstellt. Dabei repräsentiert $Z_n(\mathbf{x})$ die Oberflächentiefe des Tuches im Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit n . Die Rotationsgeschwindigkeit des Tuches bestimmt dabei die diskretisierte Zeit n . Da in diesem Abschnitt nur der Konditionierprozess betrachtet wird, werden die Poren im Tuch vorerst vernachlässigt und es wird ein Tuch ohne Poren angenommen; die Betrachtungen für ein Tuch mit Poren folgen in Kapitel 3.2.1.3.

Der Startwert für die Oberflächentiefe des Tuches liegt bei $Z_0(\mathbf{x}) \equiv 0$. Da der Konditionierungsprozess die Tiefe erhöht, ist $Z_n(\mathbf{x})$ nichtnegativ. Aufgrund der Stationarität ist die eindimensionale Verteilungsfunktion des Zufallsfeldes unabhängig von $\mathbf{x}$ (vereinfachte Notation: $Z_n = Z_n(\mathbf{x})$).

Der Effekt einer Konditionierscheibe mit gleichverteilten Konditionierelementen kann durch den Effekt eines eindimensionalen Balkenkonditionierers angenähert werden (vgl. Borucki, 2004). Die N Konditionierelemente auf der Konditionierscheibe werden dabei auf einer Linie mit mittlerem Abstand d_2 , $d_2 \leq r_{Tuch}$, angeordnet (Abb. 3.1). Ein Punkt x der Tuchoberfläche trifft diesen vereinfachten Konditionierer einmal pro Tuchumdrehung. Bei jeder Umdrehung verschiebt sich die Position eines Konditionierelementes innerhalb seines Intervalls der Länge d_2 unabhängig von den anderen.

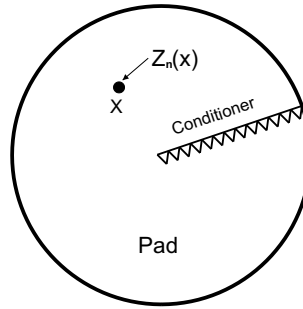


Abbildung 3.1: Schematische Abbildung des vereinfachten Konditionierers mit dreieckigen Konditionierelementen (Wiegand und Stoyan, 2006b).

Diese Vereinfachung erlaubt es, die Betrachtungen auf lediglich ein fixiertes Tuchsegment der Länge d_2 zu beschränken. Dieses Segment liegt auf einem Strahl mit Richtung $\varphi \in [0, 2\pi]$, in der Mitte des Tuches beginnend. Die Mitte des Segmentes sei der Ursprung, bezeichnet mit $(0, \varphi_0)$, und das Segment wird durch das Intervall $(-a, \varphi_0) \leq (r, \varphi_0) \leq (a, \varphi_0)$ mit $2a = d_2$ repräsentiert. Zur Vereinfachung der Notation wird das fixierte φ_0 im Folgenden weggelassen. Das Intervall $-a \leq r \leq a$ enthält bei jeder Rotation ein Konditionierelement. Das Zentrum des Konditionierelementes ist gleichverteilt in $[-a, +a]$ positioniert.

Für die folgenden Berechnungen bleibt der Konditionierer an einer fixierten Tiefe. Für einen Konditionierer, der sich in einer deterministischen Art und Weise auf das Tuch zubewegt, können die Ableitungen in Borucki u. a. (2004) angewendet werden.

Herleitung

Wie oben dargestellt, können die Betrachtungen auf das Intervall $-a \leq r \leq a$ beschränkt werden. Ein Konditionierelement trifft dieses Intervall einmal pro Schritt (Rotation). Wie in Borucki u. a. (2004) wird ein Konditionierelement zunächst vereinfacht als Dreiecksfunktion modelliert. Am Ende des Abschnittes folgt eine Verallgemeinerung auf beliebige Formen. Das Profil eines dreieckigen Konditionierelementes (Abb. 3.2) mit Zentrum in 0 kann durch folgende Funktion dargestellt werden:

$$V(r) = h - \frac{h}{a}|r|, \quad -a \leq r \leq a, \quad (3.1)$$

mit $V(r)$ als die Tiefe des Konditionierelementes in r . Die Parameter h und a kennzeichnen die Größe des eindimensionalen Balkenkonditionierers. Gleichung (3.1) entspricht Gleichung (2.1.) in Borucki u. a. (2004) in anderer Notation.

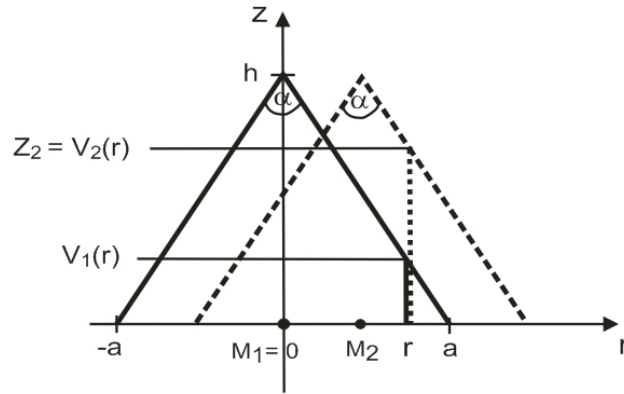


Abbildung 3.2: Das Profil eines dreieckigen Konditionierelementes ist gegeben durch den Öffnungswinkel α , die Tiefe h und die Breite $d_2 = 2a$. In einem ersten Schritt der Konditionierung (fett gedruckte Linie) liegt das Zentrum M_1 des Konditionierelementes in 0. Am Punkt r wird eine Schnitttiefe $V_1(r)$ erzeugt. In einem zweiten Schritt (gestrichelte Linie) könnte das Zentrum in den Punkt M_2 fallen. Dann beträgt die Tiefe in r gerade $V_2(r)$. Die Schnitttiefe Z_2 in r nach zwei Schritten ist das Maximum von $V_1(r)$ und $V_2(r)$. Im hier gezeichneten Fall ist $Z_2 = V_2(r)$ (Wiegand und Stoyan, 2006a).

Bezeichne nun $V_i(r)$ die Tiefe des Konditionierelementes in r zur Zeit i . Aufgrund der Tatsachen:

1. das Zentrum M_i des Konditionierelementes zur Zeit i ist gleichverteilt im Intervall $[-a, +a]$ positioniert,
2. es werden periodische Randbedingungen angenommen,

3. es gilt die Beziehung: $V_i = V(r - M_i)$,

ist V_n ebenfalls gleichverteilt. Die zugehörige Verteilungsfunktion lautet:

$$F_1(z) = \frac{z}{h}, \quad 0 \leq z \leq h.$$

Eine fixierte Position r hat nach n Zeitschritten ($= n$ Rotationen) n -mal ein Konditionierelement getroffen. Die Schnitttiefen $V_1, V_2, \dots, V_n$ sind unabhängig und gleichverteilt. Das Maximum über $V_1, V_2, \dots, V_n$ liefert die Oberflächentiefe Z_n nach n Zeitschritten (Abb. 3.2). Somit ergibt sich für die Verteilungsfunktion der Oberflächentiefe Z_n eines konditionierten Tuches ohne Poren:

$$F_n(z) = F_1(z)^n = \frac{z^n}{h^n}, \quad 0 \leq z \leq h. \quad (3.2)$$

Die zugehörige Dichtefunktion lautet:

$$f_n(z) = n \frac{z^{n-1}}{h^n}, \quad 0 \leq z \leq h. \quad (3.3)$$

Die Funktion $F_n(z)$ kann wie folgt umgeformt werden:

$$F_n(z) = \left(1 + \frac{1}{h}(z - h)\right)^n, \quad 0 \leq z \leq h. \quad (3.4)$$

Gleichung (3.4) entspricht Gleichung (3.3) in Borucki u. a. (2004) in anderer Notation. Es sei angemerkt, dass beim Vergleich des Resultates in dieser Arbeit mit dem in Borucki u. a. (2004) die Oberflächentiefe hier als positive und nicht als negative Variable betrachtet wird.

Für kleine Werte von „ $(z - h)/h$ “ kann die Verteilungsfunktion, unter Verwendung der bekannten Approximation $(1 + x)^n \approx \exp(nx)$, durch eine Exponentialfunktion angenähert werden:

$$F_n(z) = \exp(\lambda_1(z - h)), \quad z \approx h, \quad \lambda_1 = \frac{n}{h}. \quad (3.5)$$

Abbildung 3.3 zeigt die Dichtefunktion (3.3) der Oberflächentiefe eines Tuches ohne Poren nach $n = 6$ Zeitschritten mit Konditionierelementen der Tiefe $h = 5 \mu\text{m}$.

Betrachtet man eine beliebige Form $V(r)$ der Konditionierelemente (anstelle des Dreiecks), ist die Verteilungsfunktion $F_1(z)$ der zufälligen Schnitttiefe V_i im i -ten Schritt gegeben durch:

$$F_1(z) = \frac{\nu(\{r : V(r) \leq z\})}{2a}, \quad -a \leq r \leq +a,$$

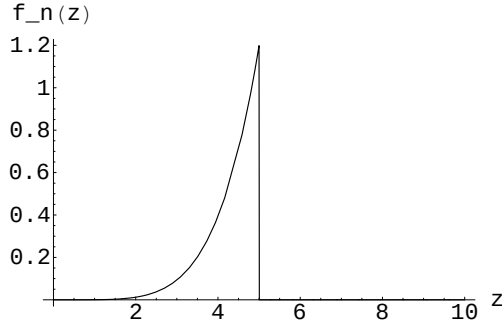


Abbildung 3.3: Dichtefunktion der Oberflächentiefe eines Tuches ohne Poren nach $n = 6$ Zeitschritten, gegeben durch (3.3). Analog Borucki u. a. (2004) beträgt die Tiefe eines Konditionierelementes $h = 5 \mu\text{m}$ (Wiegand und Stoyan, 2006a).

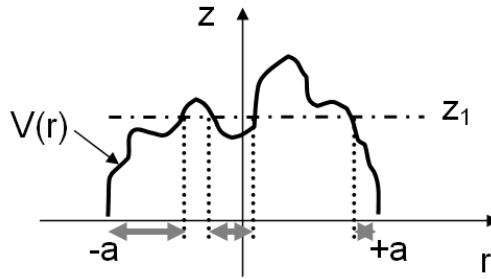


Abbildung 3.4: Profil eines beliebigen Konditionierelementes mit Zentrum in 0. Die grauen Pfeile kennzeichnen die Menge aller Punkte r , in denen $V(r)$ kleiner bzw. gleich z_1 ist (Wiegand und Stoyan, 2006a).

wobei ν für das Lebesgue-Maß und $V(r)$ für die Tiefe des Konditionierelementes in r steht.

Die Boolesche Funktion als Modell

Wie in den grundlegenden Annahmen erläutert, werden die Betrachtungen der Tuchoberfläche auf das Intervall $-a \leq r \leq a$ beschränkt. Anstelle des zweidimensionalen Zufallsfeldes $\{Z_n(\mathbf{x})\}$, $\mathbf{x} = (r, \varphi)$, wird daher der eindimensionale Zufallsprozess $\{Z_n(r)\}$ betrachtet, wobei $Z_n(r)$ der Wert des Zufallsfeldes $\{Z_n(\mathbf{x})\}$ am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit n ist.

Der Zufallsprozess $\{Z_n(r)\}$ ist ein Spezialfall einer Booleschen Funktion, d. h. die Oberflächentiefe Z_n in r ergibt sich wie folgt:

$$Z_n(r) = \sup_{M_i \in \Phi_n} V(r - M_i),$$

wobei $\Phi_n = \{M_1, M_2, \dots, M_n\}$ ein eindimensionaler Poisson-Punktprozess mit Intensität n und $V(r - M_i)$ das in den Punkt M_i verschobene Profil des Konditionierelementes ist. (Der Punkt M_i des Punktprozesses entspricht der Position der Mitte des Konditionierelementes bei Rotation i . Aufgrund der angenommenen gleichverteilten Positionen der Mitten kann der Prozess durch einen Poisson-Prozess modelliert werden.)

Um den Anwender mit den Annahmen und Hintergründen des Modells vertraut zu machen, wurde zur Berechnung der eindimensionalen Dichtefunktion nicht einfach die Formel der Booleschen Funktion angewendet (vgl. Kapitel 2.2.1.2 mit Beispiel 2.2.1), sondern anhand des vorliegenden praktischen Problems die Dichtefunktion hergeleitet.

Neben der eindimensionalen Verteilungsfunktion können mithilfe von Formeln für die Boolesche Funktion (vgl. Jeulin, 1991 bzw. Jeulin und Jeulin, 1981) auch weitere Kenngrößen für das Konditionieren entwickelt werden. Mögliche Ansätze wären z. B. mithilfe der Korrelationsfunktion die Korrelation der Oberflächentiefe an zwei verschiedenen Punkten zu beschreiben oder die mittlere Anzahl von Erhöhungen pro Flächeneinheit anzugeben.

Ein weiteres Beispiel

In einigen Industriezweigen werden Bürsten anstelle von Diamanten als Konditionierelemente eingesetzt. Die Bürstenkonditionierer kann man sich als Platte mit Borsten anstelle der Diamanten vorstellen. Die Kanten der Borsten sind abgerundet, womit der resultierende Schnitt in der Tuchoberfläche „sanfter“ ist. Die Form solch eines Konditionierelementes kann durch die folgende quadratische Funktion modelliert werden:

$$V(r) = -\frac{h}{a^2}r^2 + h, \quad -a \leq r \leq a.$$

Dann ergibt sich für die Verteilungsfunktion der Oberflächentiefe

$$F_n(z) = \left(1 - \sqrt{\frac{z-h}{-h}}\right)^n \approx \exp\left(-n\sqrt{\frac{h-z}{h}}\right), \quad 0 \leq z \leq h.$$

3.2.1.3 Beschreibung der konditionierten Poliertuchoberfläche mithilfe der Kombination aus Booleschem Modell und Boolescher Funktion

Als Quintessenz aus den beiden vorangegangenen Modellen, bei denen die Struktur eines Poliertuches und die Konditionierung eines Tuches ohne Poren jeweils für sich separat

betrachtet wurden, kann nun die Kombination dieser beiden Modelle hergeleitet werden, um letztendlich die konditionierte Oberfläche eines porösen Tuches zu beschreiben. Veränderungen in der Tuchoberfläche, die durch den direkten Polierprozess hervorgerufen werden, wurden im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter untersucht und somit bei dieser Modellierung vernachlässigt, was mit Blick auf die minimale Veränderung der Tuchstruktur innerhalb *einer* Polierfahrt — die diesem Modell zugrunde liegt — unproblematisch ist. Es sei jedoch angemerkt, dass sich durch die Addition dieser minimalen Unterschiede über die *gesamte* Tuchlebensdauer sehr wohl signifikante Veränderungen in der Tuchstruktur ergeben, die letztlich in der Ermüdung des Tuches zum Ausdruck kommen. Deren Modellierung geht jedoch über das Ziel dieser Arbeit hinaus.

Die Struktur von porösen Tüchern wurde in Abschnitt 3.2.1.1 mithilfe der stationären zufälligen abgeschlossenen Mengen beschrieben. Der Konditionierprozess wurde im Abschnitt 3.2.1.2 mit der Booleschen Funktion modelliert. Das gesuchte Zufallsfeld $\{Z_n^*(\mathbf{x})\}$ zur Beschreibung der *konditionierten Tuchoberfläche* ist nun die Kombination aus stationärer zufälliger abgeschlossener Menge (oder speziell dem Booleschen Modell) und der Booleschen Funktion (vgl. 2.4.1).

Zuerst wird das Tuch wie beim Nichtvorhandensein von Poren behandelt. Sei Z_n die Oberflächentiefe nach n Schnitten, dann ist die zugehörige Dichtefunktion approximativ:

$$f_n(z) = \begin{cases} \frac{n}{h} \exp\left(\frac{n}{h}(z - h)\right), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Nun betrachte man einen beliebigen Punkt $(r, Z_n(r))$, wobei $Z_n(r)$ der Wert des Zufallsfeldes $\{Z_n(\mathbf{x})\}$ am Punkt $\mathbf{x}$ ist. Aufgrund der Stationarität des Zufallsfeldes kann dieser Punkt wie der Ursprungspunkt behandelt werden. Folglich ist die zusätzliche Tiefe bei r entweder 0 (mit Wahrscheinlichkeit V_V) oder positiv mit Verteilungsfunktion H_l . Die Oberflächentiefe Z_n^* ergibt sich demnach aus der Summe von zwei Zufallsvariablen (vgl. Modell in Kapitel 2.4.1 und Abbildung 3.5) mit Dichtefunktionen $f_n(z)$ und $g_L(z)$,

$$g_L(z) = \begin{cases} V_V \delta(z) + (1 - V_V) h_l(z), & z \geq h, \\ 0, & z < 0, \end{cases}$$

$$h_l(z) = \lambda_2 \exp(-\lambda_2 z).$$

Die Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ der zufälligen Oberflächentiefe Z_n^* eines mit Diamanten kondi-

tionierten porösen Tuches ergibt sich durch Faltung von $f_n(z)$ und $g_L(z)$ (siehe 2.4.1.2):

$$f_{Z_n^*}(z) = \begin{cases} \frac{\frac{n}{h}(1-V_V)\lambda_2}{\frac{n}{h}+\lambda_2} (\exp(\lambda_2(h-z)) - \exp(-n-\lambda_2 z)), & z > h, \\ V_V \frac{n}{h} \exp(\frac{n}{h}(z-h)) + \frac{\frac{n}{h}(1-V_V)\lambda_2}{\frac{n}{h}+\lambda_2} (\exp(\frac{n}{h}z - n) - \exp(-n-\lambda_2 z)), & 0 \leq z \leq h, \\ 0, & z < 0, \end{cases} \quad (3.6)$$

wobei

- V_V ... der Volumenanteil des Tuches (Feststoff),
- λ_2 ... der Parameter der linearen Kontaktverteilungsfunktion des Tuches,
- n ... die diskretisierte Zeit des Konditionierens (= Anzahl der Rotationen) und
- h ... die Tiefe des Konditionierelementes (mit dreiecksähnlichem Querschnitt)

sind. Die Parameter V_V und λ_2 beschreiben die Tuchstruktur, während n und h Parameter des Konditionierprozesses sind.

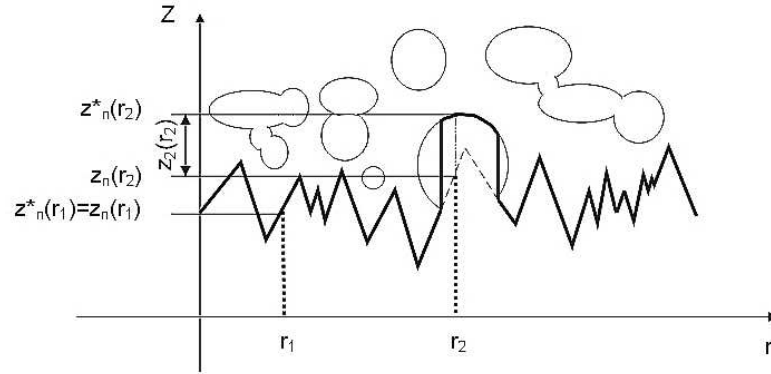


Abbildung 3.5: In dieser schematischen Darstellung hat die zufällige abgeschlossene Menge elliptische Poren. Die fett gedruckte Linie mit scharfen Zacken stellt die Oberflächentiefe Z_n eines konditionierten Tuches ohne Poren dar. Im Punkt r_1 geschieht der Schnitt in der festen Phase des Tuches und somit ist $Z_n^*(r_1) = Z_n(r_1)$. Im Punkt r_2 trifft der Schnitt auf eine Pore. Somit ist die Oberflächentiefe $Z_n^*(r_2)$ die Summe aus der Tiefe des konditionierten Tuches ohne Poren und der Restsehnenlänge in vertikaler Richtung in der Pore (Wiegand und Stoyan, 2006a).

3.2.2 Experimentelle Verifizierung der stochastischen Modelle

Hauptziel dieses Kapitels ist es, die Gültigkeit der in 3.2.1 beschriebenen stochastischen Modelle für die Poliertuchoberfläche experimentell zu verifizieren. Es wird zunächst demonstriert, dass die Grundannahme des stochastischen Modells aus Abschnitt 3.2.1.1, die Exponentialform der linearen Kontaktverteilungsfunktion, realistisch ist. Als nächstes wird gezeigt, dass das analytische Hauptresultat (3.6), die Dichtefunktion einer konditionierten Oberfläche eines porösen Tuches, mit empirischen Daten übereinstimmt. Dazu war eine Evaluierung von verschiedenen Messmethoden notwendig, auf die ausführlich eingegangen wird.

Weiterhin wurde an Tüchern mit unterschiedlichen Porositäten die Härte gemessen, um den Zusammenhang zwischen Porosität und Härte (beispielhaft für andere physikalische Tuchparameter) aufzuzeigen. Die Ergebnisse werden hier dargelegt.

Abschließend wurde mit der ausgewählten Messmethode die Oberfläche von Tüchern unterschiedlicher Polierqualitäten untersucht. Mit den Ergebnissen soll letztlich ein Parameter benannt werden, mit dem ein ideales Poliertuch charakterisiert bzw. mit dem ein ideales Poliertuch designt werden kann. Ein ideales Poliertuch zeichnet sich durch die Fähigkeit aus, eine geringe Unebenheit auf der polierten Waferoberfläche bei konstant hoher Abtragsrate zu erzielen.

3.2.2.1 Verifizierung des Modells für das Poliertuch mittels REM

Im Folgenden wird gezeigt, dass die Grundannahme des stochastischen Modells für Poliertücher, die Exponentialform der linearen Kontaktverteilungsfunktion, realistisch ist.

Dazu wurde ein Dünnschliff von einem gebrauchten Porentuch angefertigt und mittels Rasterelektronenmikroskopie analysiert (zur Beschreibung der Rasterelektronenmikroskopie vgl. Reimer und Pfefferkorn, 1977). Abbildung 3.6 zeigt die mit Rasterelektronenmikroskopie erhaltene Dünnschliffaufnahme dieses Tuches.

Es ist deutlich sichtbar, dass die Poren Kugeln sind. Diese werden in der stochastischen Modellierung als Körner betrachtet. Die verschiedenen Grautöne der Poren werden durch unterschiedliche Tiefen verursacht: Dunkle Poren haben ihr Zentrum tiefer im mikrosko-

pierten Dünnschnitt. Die kugeligen Poren in Abbildung 3.6 scheinen disjunkt zu sein. Dies ist kein starker Widerspruch zur Annahme eines Booleschen Modells, da für den betrachteten Dünnschnitt Porosität und Intensität λ sehr klein sind.

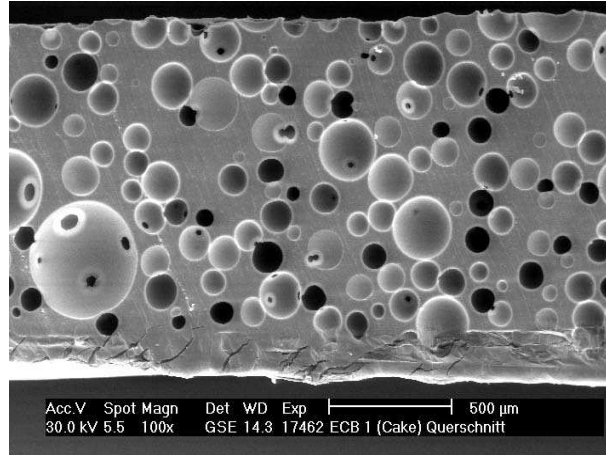


Abbildung 3.6: Dünnschliffaufnahme eines gebrauchten Porentuches mittels Rasterelektronenmikroskopie (Wiegand und Stoyan, 2006b).

Bekanntlich ist die Projektion eines dreidimensionalen Booleschen Modells auf eine Ebene ein ebenes Boolesches Modell (Stoyan u. a., 1995, S. 81 ff.). Daher sollte sich eine Ebene wie in Abbildung 3.6 gezeigte Struktur wie ein ebenes Boolesches Modell verhalten, wenn die räumliche Struktur durch ein räumliches Boolesches Modell beschrieben werden kann. Eine Messung der Verteilung der Sehnenlänge ergab das in Abbildung 3.7 gezeigte Histogramm. Die Häufigkeitsverteilung kann gut durch eine Exponentialfunktion angepasst werden (p -Wert des χ^2 -Anpassungstests ist 0,22). Exponential verteilte Sehnenlängen sind äquivalent zu einer exponentiellen linearen Kontaktverteilungsfunktion (Stoyan u. a., 1995, Gleichung 6.2.5). Es ergibt sich, dass die lineare Kontaktverteilungsfunktion der projizierten zufälligen Menge einer Exponentialverteilung folgt. Eine wichtige notwendige Bedingung eines Booleschen Modells ist damit erfüllt.

Es sei angemerkt, dass Borucki u. a. (2004) die Exponentialform der linearen Kontaktverteilungsfunktion durch Simulation erhalten. Dazu wurde ein stochastisches Modell eines Tuches mit Poren simuliert und dann „the intrinsic probability density function of the line-of-sight surface of foamed pad“ statistisch bestimmt. Abbildung 11 ist sehr ähnlich zu Abbildung 3.8 in dieser Arbeit; die in Borucki u. a. (2004) gezeigte Funktion hat die gleiche Exponentialform.

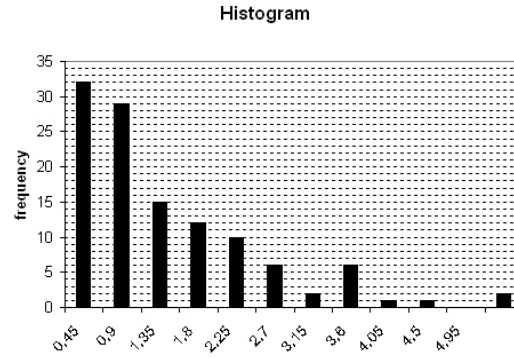


Abbildung 3.7: Histogramm für die Sehnenlängen außerhalb der Poren, gemessen in Abb. 3.6 (Wiegand und Stoyan, 2006b).

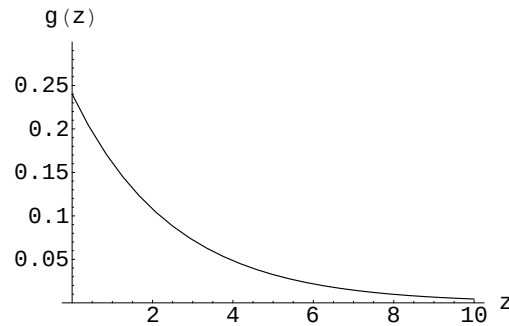


Abbildung 3.8: Dichtefunktion $h_l(z) = g(z) = \lambda_2 \exp(-\lambda_2 z)$ der linearen Kontaktverteilung, multipliziert mit $(1 - V_V)$. Der Wert des Volumenanteils V_V wurde Daten von Letitia Malina, Motorola, entnommen und beträgt $V_V = 0.4$. Der Wert für den Parameter $\lambda_2 = 0.4$ wurde aus Abb. 11 in Borucki (2004) geschätzt: Der Wert $g(z)$ der Funktion in Abb. 11 für $z = 0$ ist ungefähr 0.24. Der Quotient aus 0.24 und $1 - V_V = 0.6$ ergibt λ_2 (Wiegand und Stoyan, 2006b).

3.2.2.2 Verifizierung des Modells für die konditionierte Poliertuchoberfläche — Tastverfahren versus optisches Verfahren

In diesem Abschnitt wird das Modell eines konditionierten Tuches mit Poren, genauer gesagt die Dichtefunktion für die Oberflächentiefe, anhand experimenteller Daten verifiziert. Dazu musste zunächst ein Vergleich zweier verschiedener Messmethoden durchgeführt werden. Das Ergebnis und die Begründung der Wahl der geeigneten Messmethode wird im Folgenden vor der Verifizierung des Modells dargestellt.

Messmethoden für die Poliertuchoberfläche

Es existieren verschiedene Methoden, mit denen die Rauheit von Oberflächen gemessen werden kann. Um das Modell für die konditionierte Tuchoberfläche in dieser Arbeit zu verifizieren, wurden Proben des gleichen Tuches mit zwei verschiedenen Methoden gemessen: mit einem Tastverfahren und einem optischen Verfahren.

Das Tastverfahren wird von Tuchherstellern bei der Untersuchung der Rauheit von Tuchoberflächen eingesetzt. Bei dem hier verwendeten Tastverfahren (Rauheitsbestimmung nach DIN EN ISO 4287) wird ein Diamantkegel 90 Grad mit einer Last von 20 mN und einer Geschwindigkeit von 0,5 mm/s über eine Messstrecke von 40 mm bewegt. Alle 6 μm erfolgt eine Messung. Insgesamt werden 5 Messspuren pro Tuchprobe mit je 6666 Messwerten erzeugt. Die Messungen wurden mit dem Gerät UST 100 der Firma Innowep am Forschungsinstitut für Leder und Kunststoffbahnen, Freiberg (kurz: FILK), durchgeführt.

Das optische Verfahren arbeitet berührungslos. Für die Messung wurde das Gerät LEXT, ein konfokales Laserrastermikroskop, der Firma Olympus eingesetzt. Dieses Mikroskop verwendet die sehr kurze optische Wellenlänge von 408 nm. „Die Auflösung wird durch die konfokale Scanning Technologie gesteigert. Bei dieser Technik wird die Probe Punkt für Punkt mit einem Laserstrahl abgetastet. Auf der Detektionsseite (Photomultiplier) sorgt eine spezielle Lochblende dafür, dass von der Probe zurückreflektierte Strahlen, die nicht im Focus des Objektivs sind, vor dem Detektor abgeblockt werden. Dadurch nimmt der Photomultiplier nur Intensitäten von Signalen aus der Fokusebene auf. Dreidimensionale Informationen der Probe erhält der Anwender durch die Bewegung des Objektivs in Z-Richtung (Höhe); die jeweilige Position wird durch einen präzisen Maßstab ermittelt. So entstehen Intensitätsbilder von jeder abgetasteten Ebene der Probe, die sich mithilfe der jeder Ebene zugeordneten Höheninformation zu dreidimensionalen Bildern zusammensetzen lassen“ (Maas, 2005) und weiter analysiert werden können. Für die Messung einer rauen Tuchoberfläche wurde das 5x-Objektiv gewählt, das ein Messfeld von 2,56 mm x 1,92 mm abbildet. Bei dieser Vergrößerung wird alle 2,5 μm ein Messpunkt in x -Richtung und alle 1,9 μm ein Messpunkt in y -Richtung erzeugt. Die Messpunkte sind auf der ganzen Fläche angeordnet und nicht nur auf einer Linie.

Die Abbildungen 3.9 und 3.10 zeigen die aus den Daten der unterschiedlichen Messverfahren geschätzten Dichtefunktionen für die Oberflächentiefe einer Tuchprobe eines Fassertuches. Die Dichtefunktion des Tastverfahrens kann gut durch eine Normalverteilung angenähert werden. Hingegen genügt die des optischen Verfahrens einer anderen Vertei-

lung, auf die in späteren Ausführungen noch näher eingegangen wird.

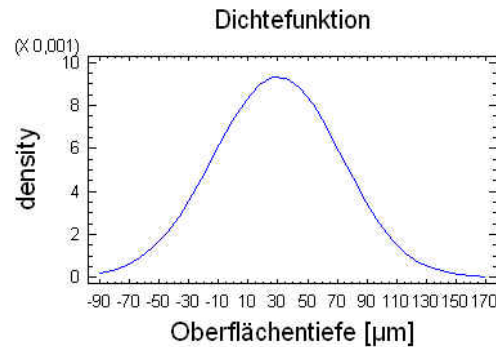


Abbildung 3.9: Geschätzte Dichtefunktion für die Oberflächentiefe eines gebrauchten Fasertuches, mit Tastverfahren gemessen.



Abbildung 3.10: Geschätzte Dichtefunktion für die Oberflächentiefe eines gebrauchten Fasertuches, mit optischem Verfahren gemessen.

Der Unterschied kann wie folgt erklärt werden:

- Beim Tastverfahren wird mit leichtem Druck die Oberfläche abgefahren. Da die Mikrostrukturen der Tuchoberfläche nachgiebig sind, wird durch den Druck die Tuchoberfläche leicht verformt. Um dies mit Daten zu belegen, wurde die dynamische Verformung der Tuchprobe unter ähnlichen Bedingungen wie bei der Rauheitsmessung bestimmt (gleiches Messgerät, Taster: Kugel 0,8 mm, Messstrecke: 90 mm, Last: 20 mN, Geschwindigkeit 0,2 mm/s). Die Gesamtverformung liegt im Mittel bei 12 μm , wobei der Anteil der elastischen Verformung ca. 10 μm und der der plastischen Verformung ca. 2 μm beträgt. Es fließen somit zusätzliche Fehler in die Messung ein, die für den Prozess wichtige feine Strukturen (die in der optischen Messung sichtbar werden) verschleiern oder gar überdecken. Im optischen Verfahren finden dagegen keine Verformungen der Tuchoberfläche statt.
- Ein weiterer Vorteil des optischen Verfahrens liegt in der schnellen Information über die Rauheit einer ganzen Fläche, die beim Tastverfahren nur mit großem

Aufwand durch viele Messspuren bereitgestellt werden kann. Die mit dem Tastverfahren ermittelte Dichtefunktion beruht auf Messpunkten der fünf Messspuren, die des optischen Verfahrens hingegen auf Messpunkten auf der ganzen Fläche.

- Des Weiteren wird beim optischen Verfahren eine feinere Auflösung gemessen: $6\text{ }\mu\text{m}$ in x -Richtung beim Tastverfahren versus $2,5\text{ }\mu\text{m}$ in x -Richtung und $1,9\text{ }\mu\text{m}$ in y -Richtung beim optischen Verfahren.

Es kann somit geschlussfolgert werden, dass das berührungslose Verfahren genauere Ergebnisse liefert. Daher wurde für eine weitere Untersuchung der Tuchoberfläche nur dieses Verfahren herangezogen.

Verifizierung des stochastischen Modells anhand empirischer Daten

Es wird nun gezeigt, dass die theoretische Dichtefunktion (3.6) mit empirischen Daten übereinstimmt.

Dazu wurden eigene Messungen an einem speziellen porösen Tuch durchgeführt. Die Oberfläche eines Fasertuches wurde unter Verwendung eines Lasertopografen analysiert. Abbildung 3.11 zeigt das Histogramm der gemessenen Tiefen, das auf 10.000 Werten auf einer Linie der Länge 1 cm basiert.

Ein Vergleich der entsprechenden geschätzten Dichtefunktion in Abbildung 3.12 mit Abbildung 3.13 zeigt qualitative Übereinstimmungen. Die Spitze bei Tiefe $z = 20$ in Abbildung 3.12 entspricht der Spitze bei Tiefe $z = 5$ in Abbildung 3.13. In beiden Abbildungen ist deutlich ein langer rechter abfallender Teil der Funktion sichtbar, dagegen ein kurzer nach links. Der Knick bei Tiefe $z = 40$ in Abbildung 3.12 (visualisiert durch einen Pfeil) deckt sich mit der bei $z = 5$ in Abbildung 3.13.

3.2.2.3 Beziehung zwischen Porosität und anderen physikalischen Parametern

Tuchhersteller geben häufig physikalische Parameter wie z. B. Härte als Qualitätsparameter ihrer Tücher an. Solche physikalischen Parameter lassen sich nur schwierig mit stochastischen Methoden fassen. Die Festigkeit von Porenbeton wird beispielsweise zur Zeit in einer aufwändigen langjährigen Forschung stochastisch modelliert, siehe Wiegand (2003), Wolf u. a. (2005) sowie Ballani u. a. (2007).

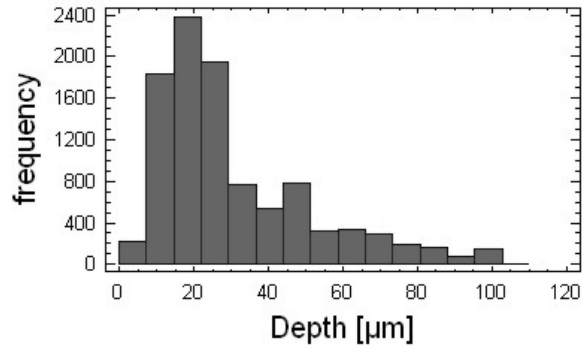


Abbildung 3.11: Histogramm der Oberflächentiefen eines gebrauchten Fasertuches (Wiegand und Stoyan, 2006b).

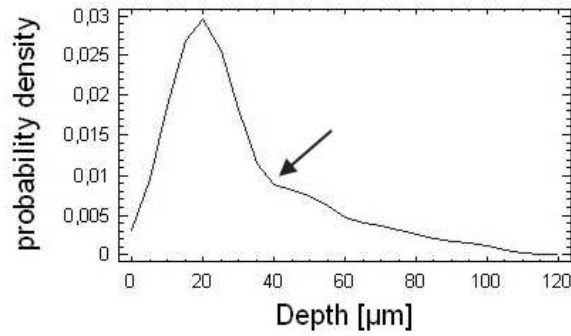


Abbildung 3.12: Geschätzte Dichtefunktion aus den Daten der Abb. 3.11 (Wiegand und Stoyan, 2006b).

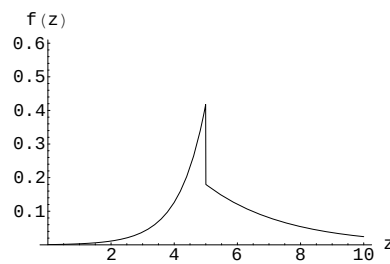


Abbildung 3.13: Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ für die Oberflächentiefe eines konditionierten Tuches, erhalten aus Formel (3.6). Die Parameter sind gleich zu denen in Abb. 3.3 und Abb. 3.8: $n = 6$, $h = 5$, $V_V = 0,4$, $\lambda_2 = 0,4$ (Wiegand und Stoyan, 2006b).

Physikalische Parameter des Tuches stehen jedoch in Wechselwirkung mit anderen stochastisch modellierbaren Kenngrößen und können somit zumindest qualitativ beschrieben werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde an Fasertüchern mit unterschiedlichen Porositäten die Härte gemessen. Die Härtemessung (Shore A) wurde gemäß DIN 53505 vom Forschungsinstitut für Leder und Kunststoffbahnen, Freiberg, durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 3.14 dargestellt. Für den untersuchten Porositätsbereich ist deutlich erkennbar, dass mit steigender Porosität die Härte des Tuches abnimmt.

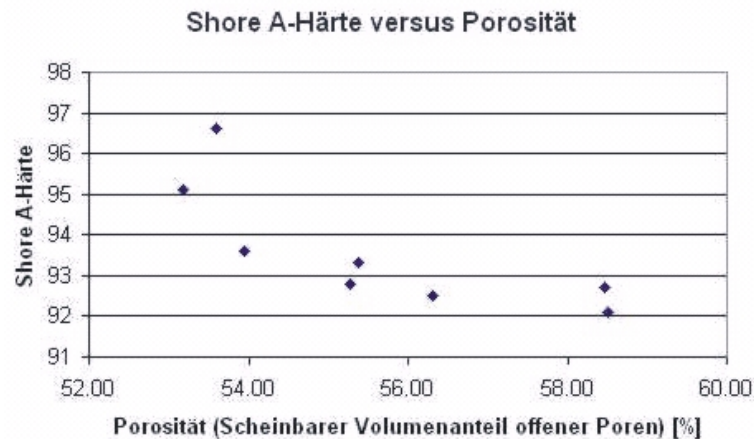


Abbildung 3.14: An Fasertüchern wurde die Porosität und die Härte vermessen. Mit steigender Porosität nimmt die Härte des Tuches ab.

Somit kann geschlussfolgert werden, dass in den Parametern des stochastischen Modells für das Tuch neben der Porosität auch Informationen über weitere physikalische Tuchparameter enthalten sind. Die Erforschung dieser Zusammenhänge geht jedoch über das Ziel dieser Arbeit hinaus.

3.2.2.4 Tücher mit unterschiedlichen Polierqualitäten

Mit der in Kapitel 3.2.2.2 ausführlich erläuterten optischen Messmethode wurden Messungen an Tüchern mit unterschiedlichen Polierqualitäten durchgeführt. Anhand der in Kapitel 3.2.2.2 verifizierten Dichtefunktion für die Oberflächentiefe eines konditionierten Poliertuches mit Poren sollen nun Kriterien zur Beurteilung der Güte von Poliertüchern herausgearbeitet werden.

Die Messungen wurden mit dem LEXT-Mikroskop der Firma Olympus durchgeführt. Es wurde das 5x-Objektiv verwendet, das ein Messfeld von 2,56 mm x 1,92 mm abtastet.

Probe	Tuchtyp	Beurteilung der Abtragsrate	Beurteilung der Ebenheit der polierten Wafer- oberfläche	Bemerkung
A	Fasertuch	i. O.	schlecht	Probe von neuem Tuch, Beurteilung anhand der ersten Polierfahrt
B	Fasertuch	i. O.	schlecht	Tuch wurde nach sehr wenigen Polierfahrten gewechselt
C	Fasertuch	i. O.	schlecht	Tuch wurde nach sehr wenigen Polierfahrten gewechselt
D	Fasertuch	i. O.	schlecht	Tuch wurde nach wenigen Polierfahrten gewechselt
E	Fasertuch	i. O.	gut	Tuch nach wenigen Polierfahrten
F	Fasertuch	i. O.	gut	Tuch nach mittlerer Anzahl von Polierfahrten (März 2006)
G	Fasertuch	i. O.	gut	Tuch nach mittlerer Anzahl von Polierfahrten (November 2006)
H	Fasertuch	gering	i. O.	Tuch nach vielen Polierfahrten
I	Fasertuch	gering	i. O.	Tuch nach mittlerer Anzahl von Polierfahrten
J	Porentuch 1	i. O.	gut	gebrauchtes Tuch
K	Porentuch 2	i. O.	schlecht	gebrauchtes Tuch

Tabelle 3.2: Auflistung der untersuchten Tuchproben mit Tuchtyp, Beurteilung der Abtragsrate, Beurteilung der Ebenheit der polierten Waferoberfläche und weiteren Bemerkungen.

Bei dieser Vergrößerung wird — wie bereits erwähnt — alle $2,5\ \mu\text{m}$ ein Messpunkt in x -Richtung und alle $1,9\ \mu\text{m}$ ein Messpunkt in y -Richtung erzeugt.

In Tabelle 3.2 sind die untersuchten Tuchproben aufgelistet.

Jede Tuchprobe wurde an drei verschiedenen Stellen untersucht und jeweils die entsprechende Dichtefunktion der Oberflächentiefe erfasst. Außerdem wurden Bilder erzeugt, mit denen die aus der Dichtefunktion abgelesene Oberflächenbeschaffenheit visuell ver-

glichen werden konnte. Im Folgenden wird für jede Probe eine zweidimensionale Aufnahme gezeigt, die mittels Lichtmikroskopie und Fokus in einer Ebene aufgenommen wurde. Weiterhin wird je eine dreidimensionale Aufnahme mittels konfokaler Lasertechnik und die Dichte- und Verteilungsfunktion, die aus den mit konfokaler Lasertechnik gewonnenen Daten geschätzt wurde, abgebildet.

Auf den zwei- und dreidimensionalen Aufnahmen der Tuchproben A, B, C und D ist deutlich ein überwiegender Bereich mit Fasern zu sehen, wobei sich die Fasern in unterschiedlichen Höhen befinden. Einige scheinen sogar auf dem Tuch zu liegen. Des Weiteren ist allgemein ein großer Porenanteil erkennbar. Tuchproben C und D zeigen einige wenige kleine ebene geschlossene Gebiete. Die zu den Tuchproben A bis D gehörenden Dichte- und Verteilungsfunktionen sind sehr breit. Tuchprobe A zeigt eine bimodale Verteilung, während Tuchproben C und D in der Dichtefunktion eine Art „Plateau“ erkennen lassen. Es wurde beobachtet, dass die Verteilungen an den unterschiedlichen untersuchten Stellen einer Probe variieren.

Auf den zwei- und dreidimensionalen Aufnahmen der Tuchproben E, F und G sind keine oben aufliegenden Fasern mehr sichtbar. Fasern erscheinen lediglich im Inneren der Poren. Der Porenanteil hat im Vergleich zu den Proben A bis D stark abgenommen. Es sind nun mehrere kleine ebene geschlossene Flächen zu sehen. Die zu den Proben E, F und G gehörenden Dichte- und Verteilungsfunktionen sind schmal. Bei den Dichtefunktionen ist ein „mittiger“ Abknickpunkt erkennbar, in dem ein langer rechter abfallender Teil der Funktion beginnt. Die Dichte- und Verteilungsfunktionen an den unterschiedlichen untersuchten Stellen einer Probe variierten nur sehr geringfügig. Es sei angemerkt, dass es bei der Messung von Tuchprobe G zu einer leichten Überstrahlung der Porenkanten kam, die sich in einem geringfügigen Messfehler äußerten. Für eine qualitative Beurteilung kann die Messung dennoch herangezogen werden.

Auf den zwei- und dreidimensionalen Aufnahmen der Tuchproben H und I sind analog zu den Proben E bis G keine oben aufliegenden Fasern mehr sichtbar. Die Fasern erscheinen lediglich im Inneren der Poren. Der Porenanteil hat im Vergleich zu den Proben E bis G erneut abgenommen und ist bei der letzten Probe sehr gering. Lediglich ab und zu tauchen große Poren auf. Die Proben H und I sind durch große zusammenhängende ebene Flächen gekennzeichnet. Die dazugehörigen Dichte- und Verteilungsfunktionen sind sehr schmal. Analog zu den Proben E bis G ist ein Abknickpunkt erkennbar, in dem ein langer rechter abfallender Teil der Funktion beginnt. Der Abknickpunkt liegt allerdings viel weiter unten als bei den Dichtefunktionen der Proben E bis G. Des Weiteren

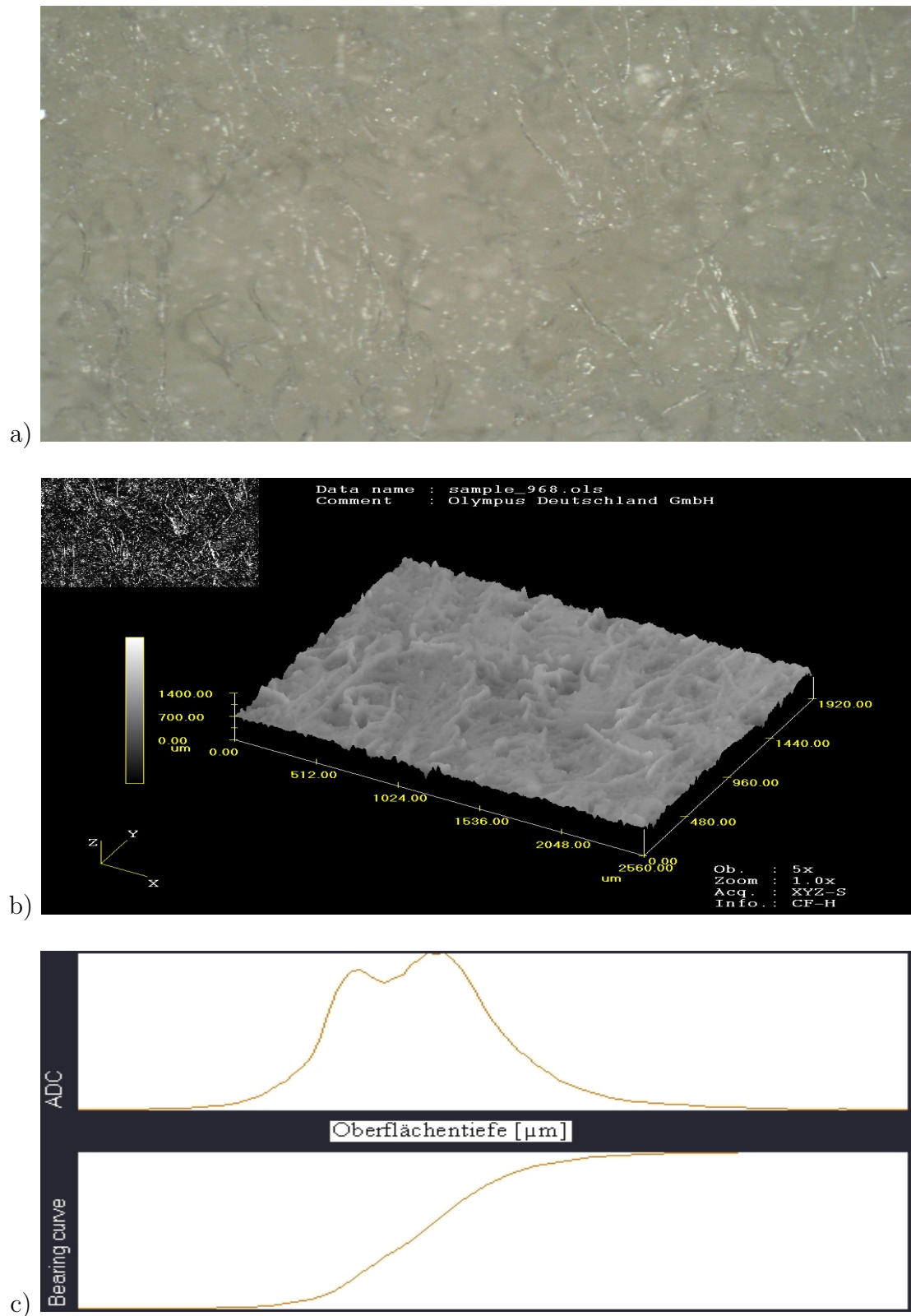


Abbildung 3.15: Tuchprobe A: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

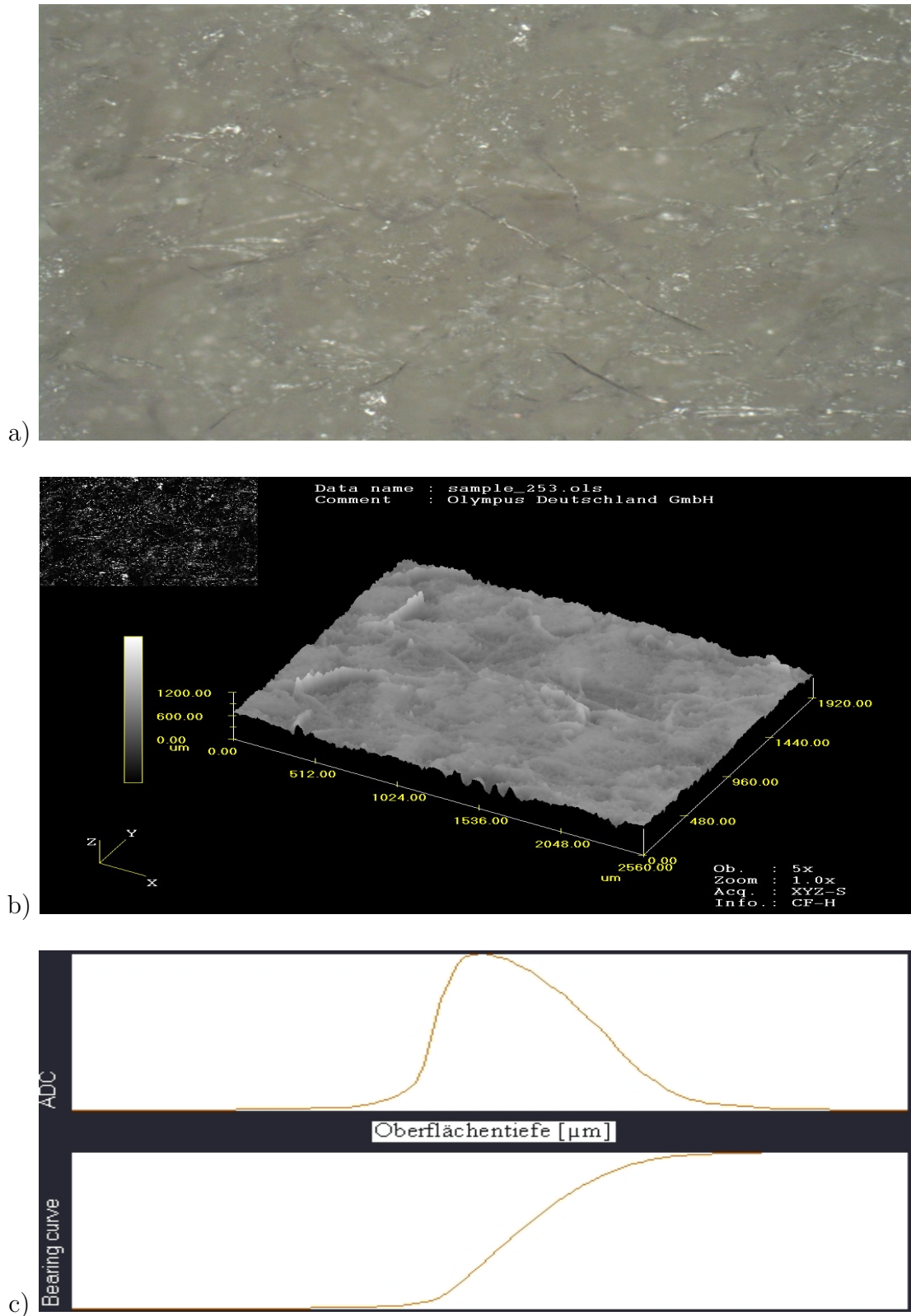


Abbildung 3.16: Tuchprobe B: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

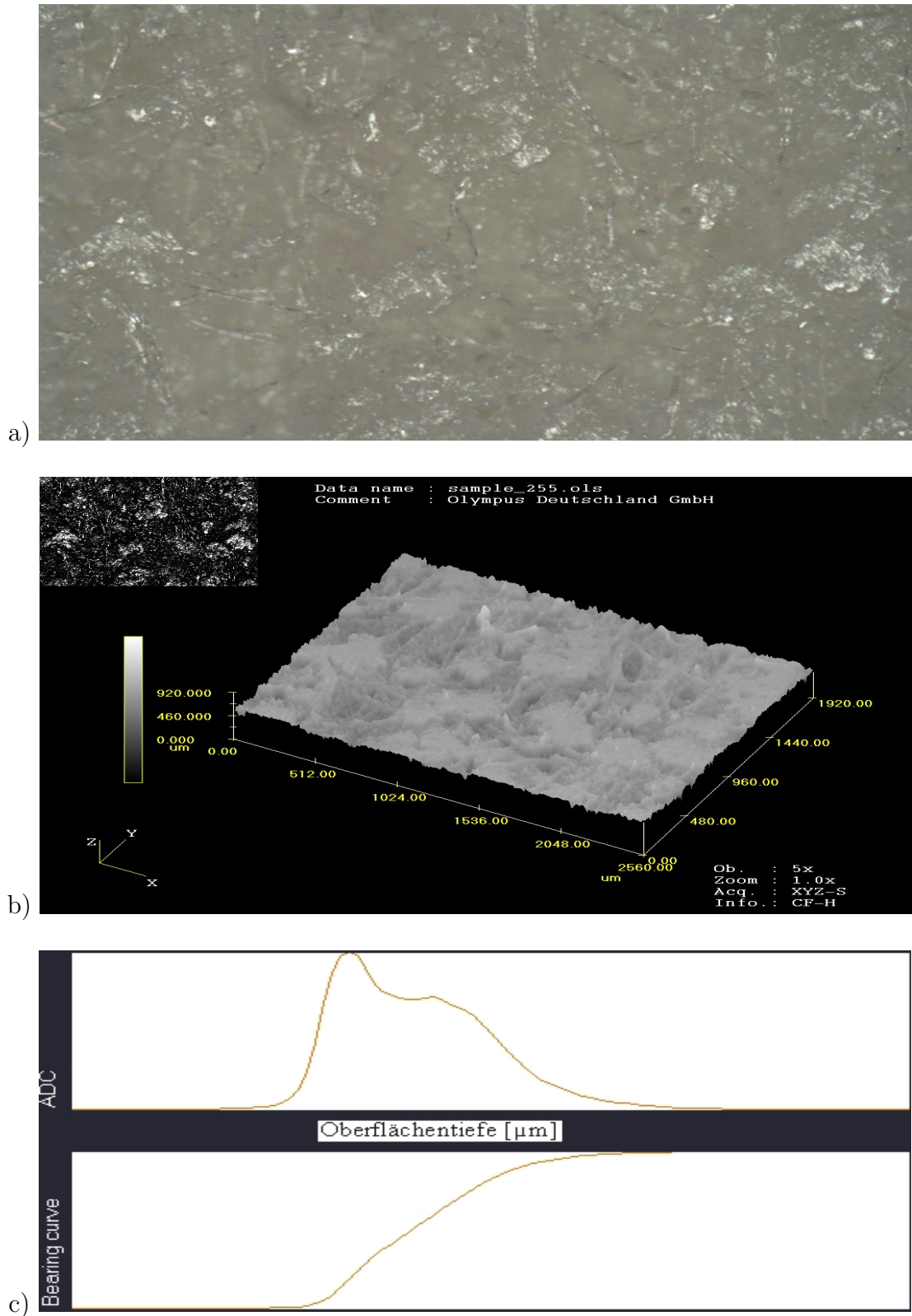


Abbildung 3.17: Tuchprobe C: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

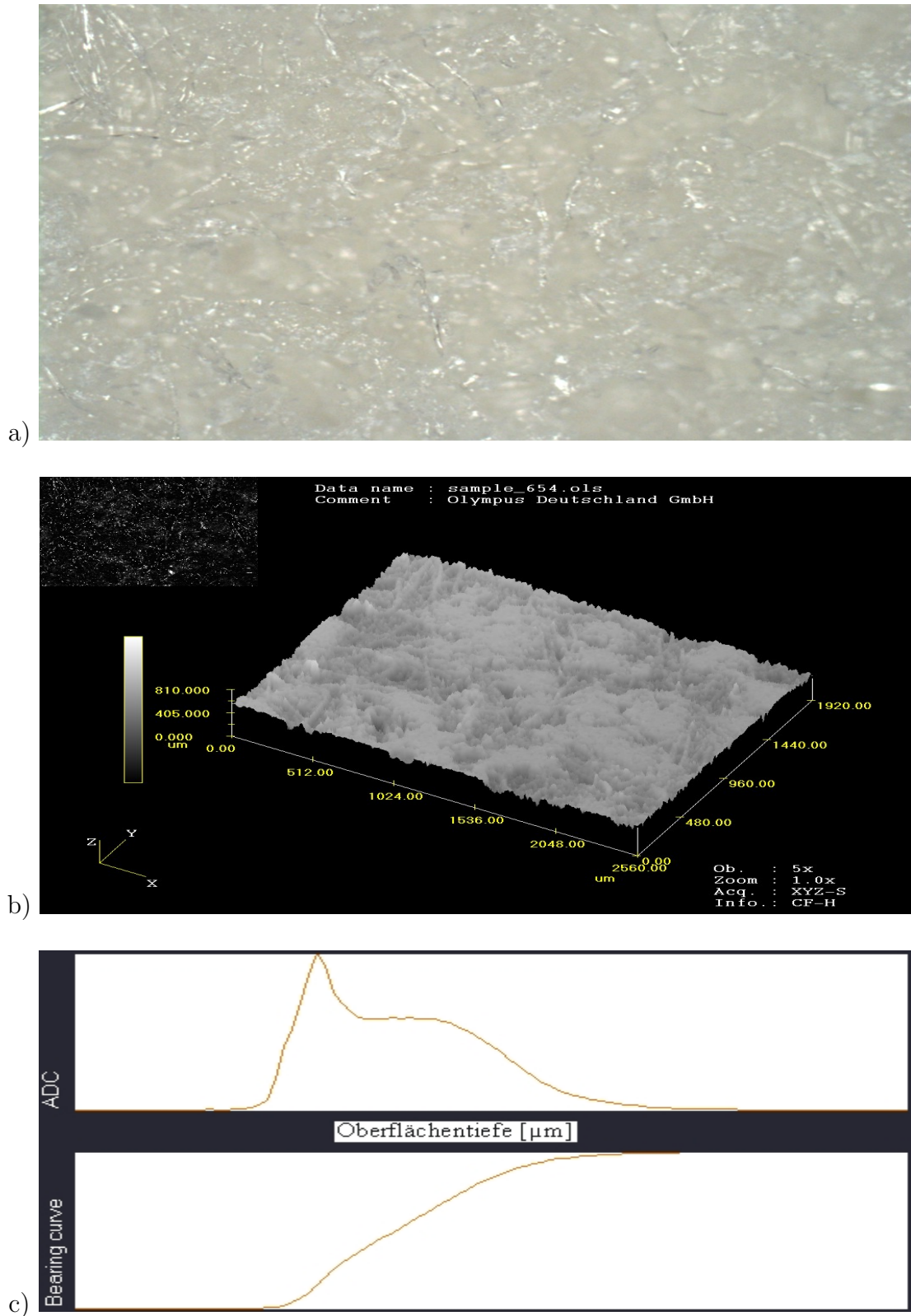


Abbildung 3.18: Tuchprobe D: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

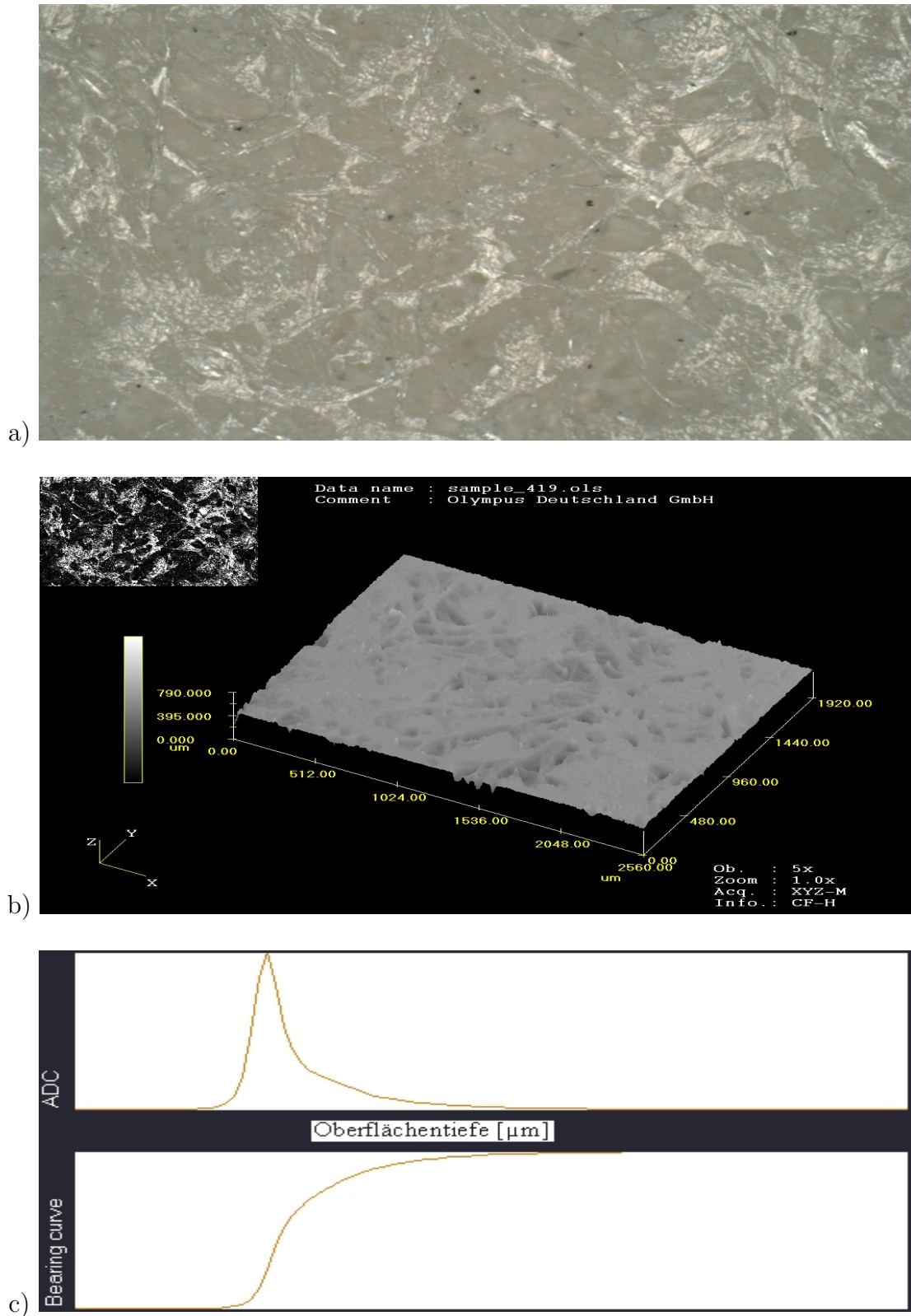


Abbildung 3.19: Tuchprobe E: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

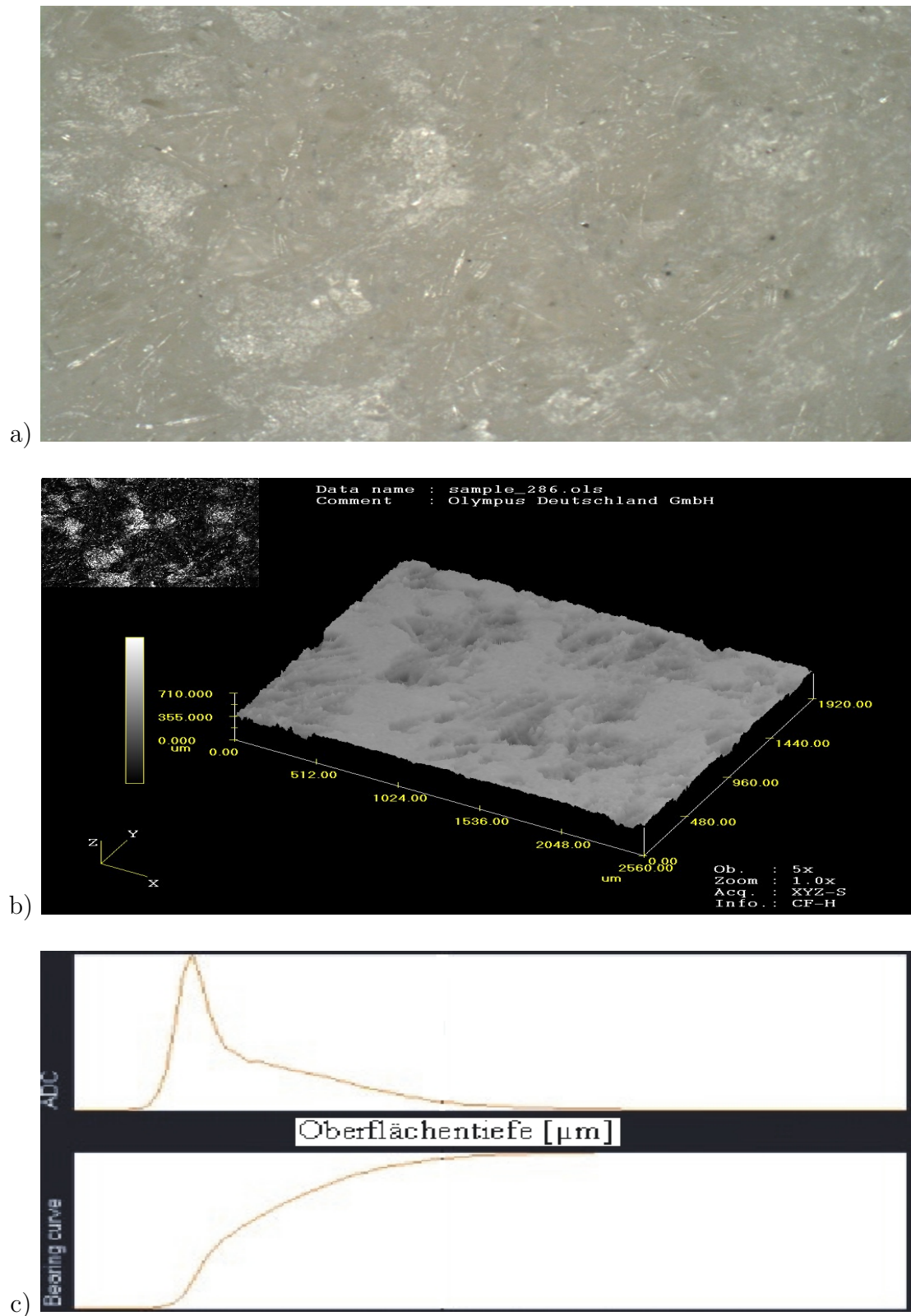


Abbildung 3.20: Tuchprobe F: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

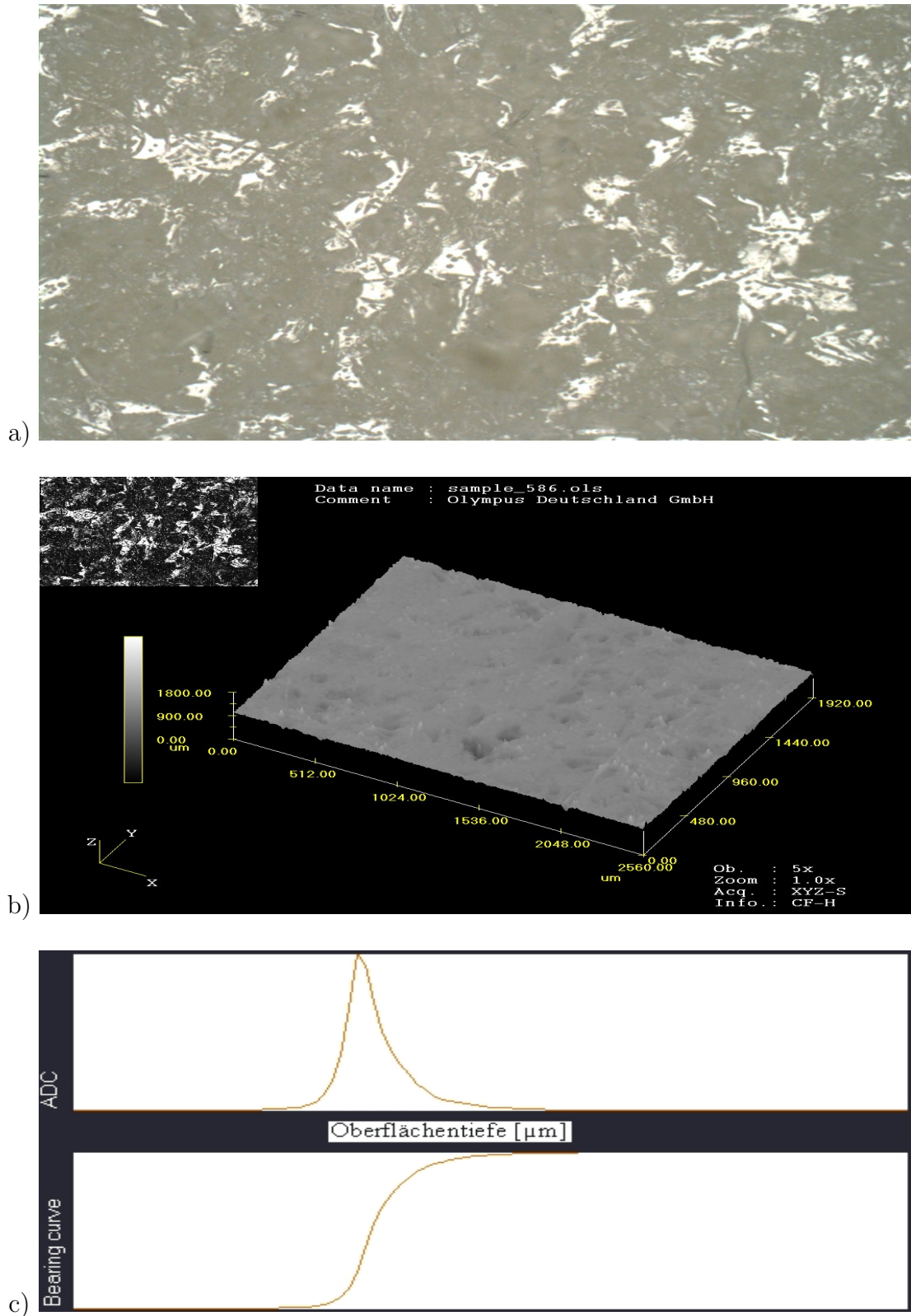


Abbildung 3.21: Tuchprobe G: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

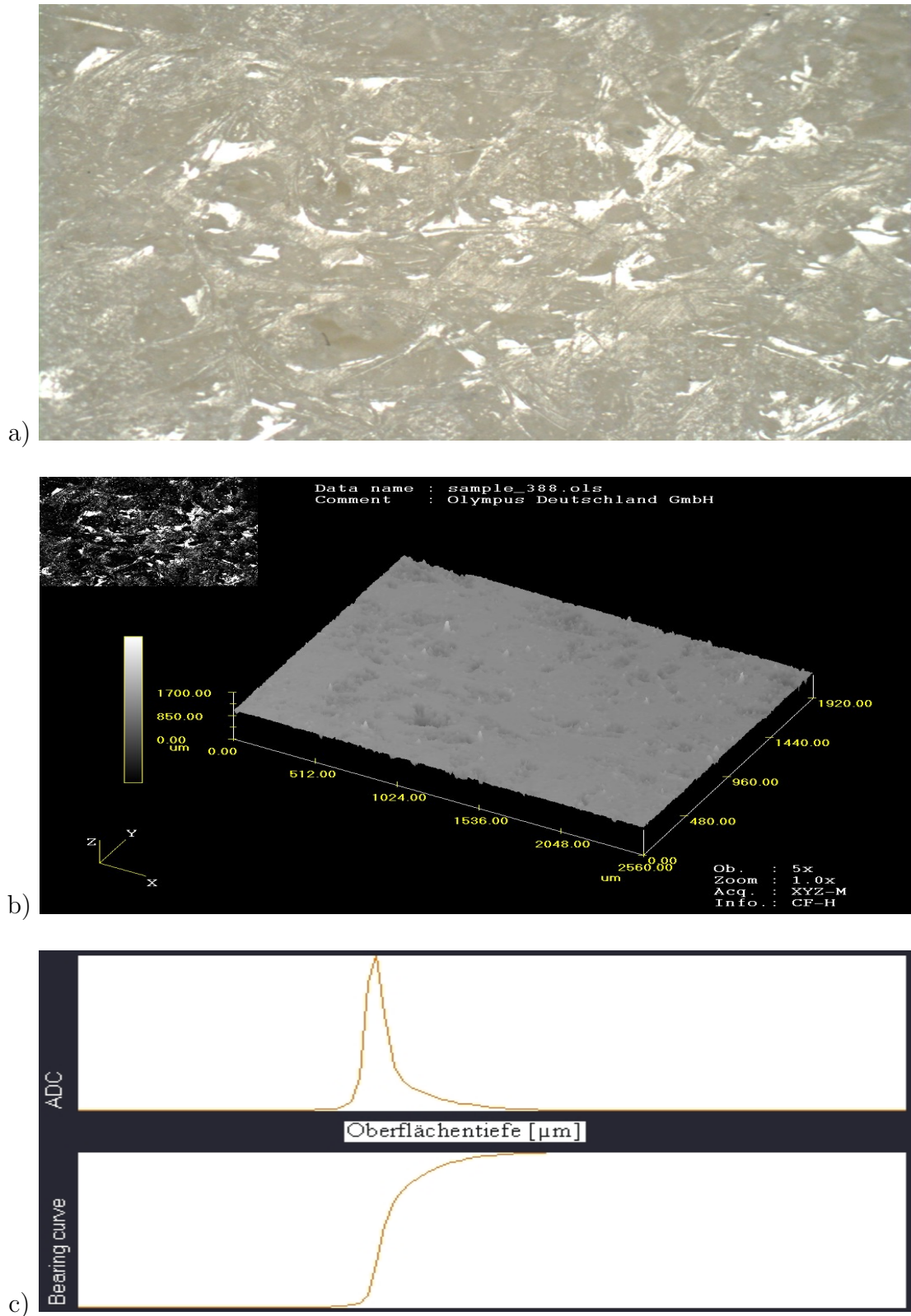


Abbildung 3.22: Tuchprobe H: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

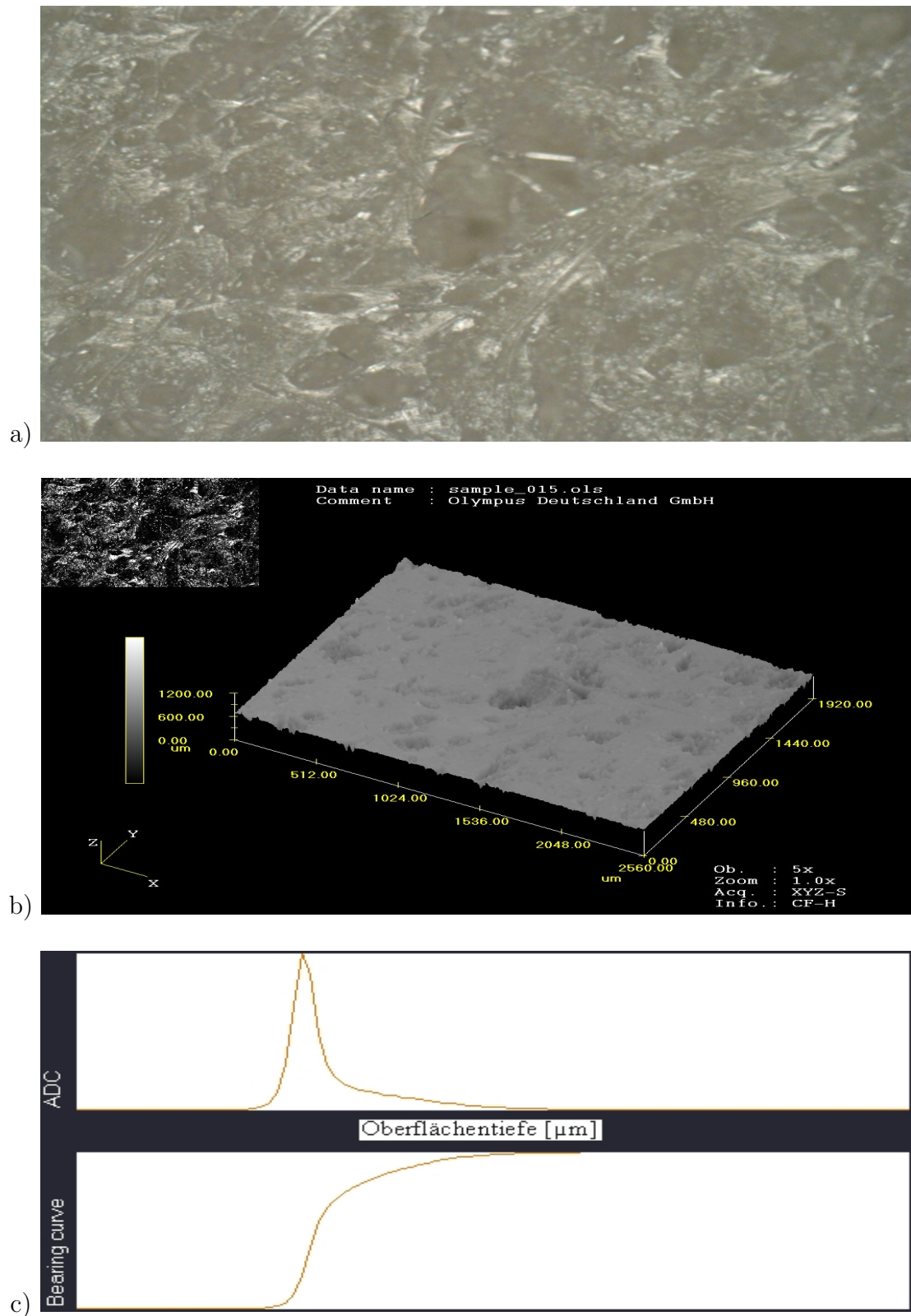


Abbildung 3.23: Tuchprobe I: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

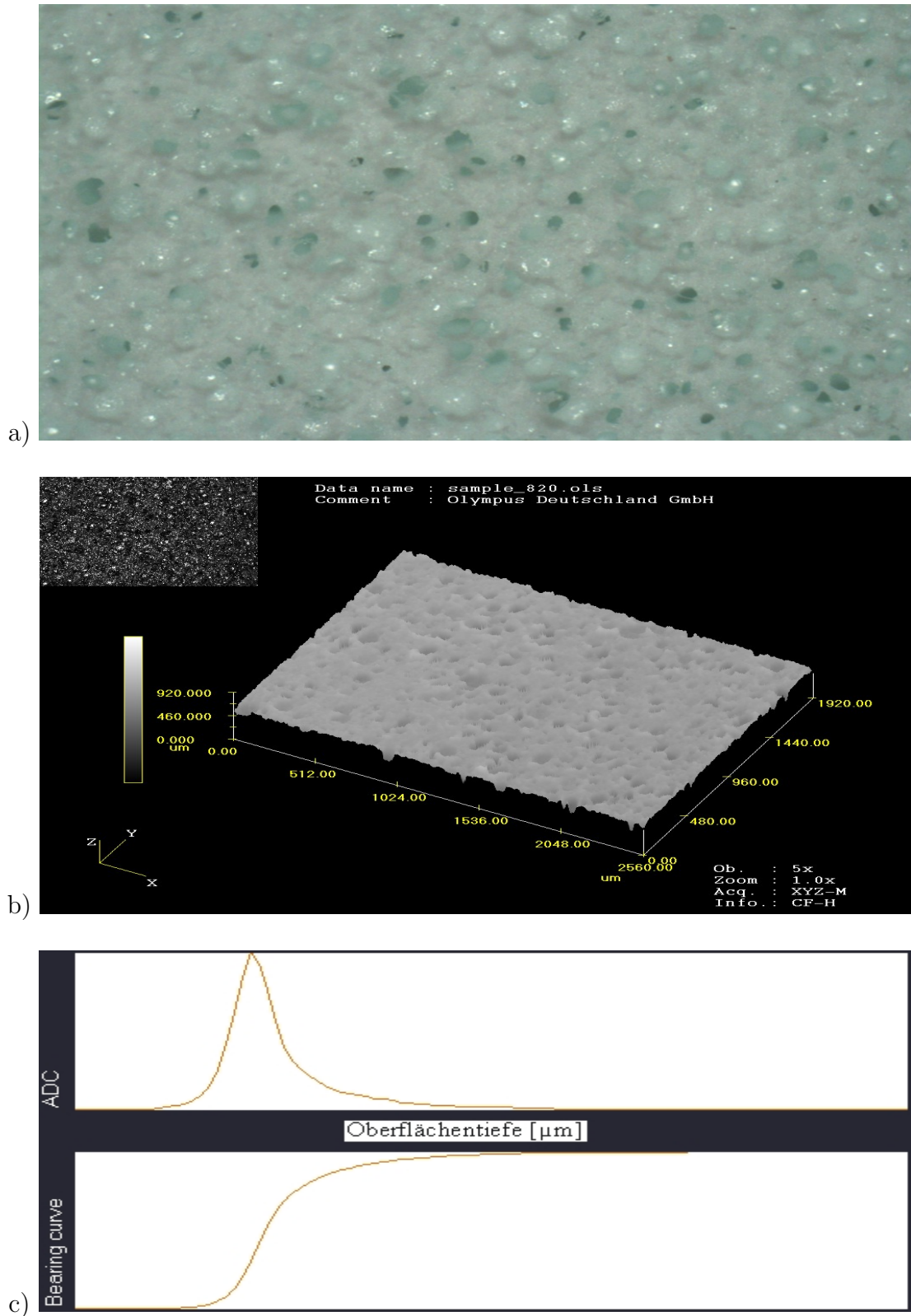


Abbildung 3.24: Tuchprobe J: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

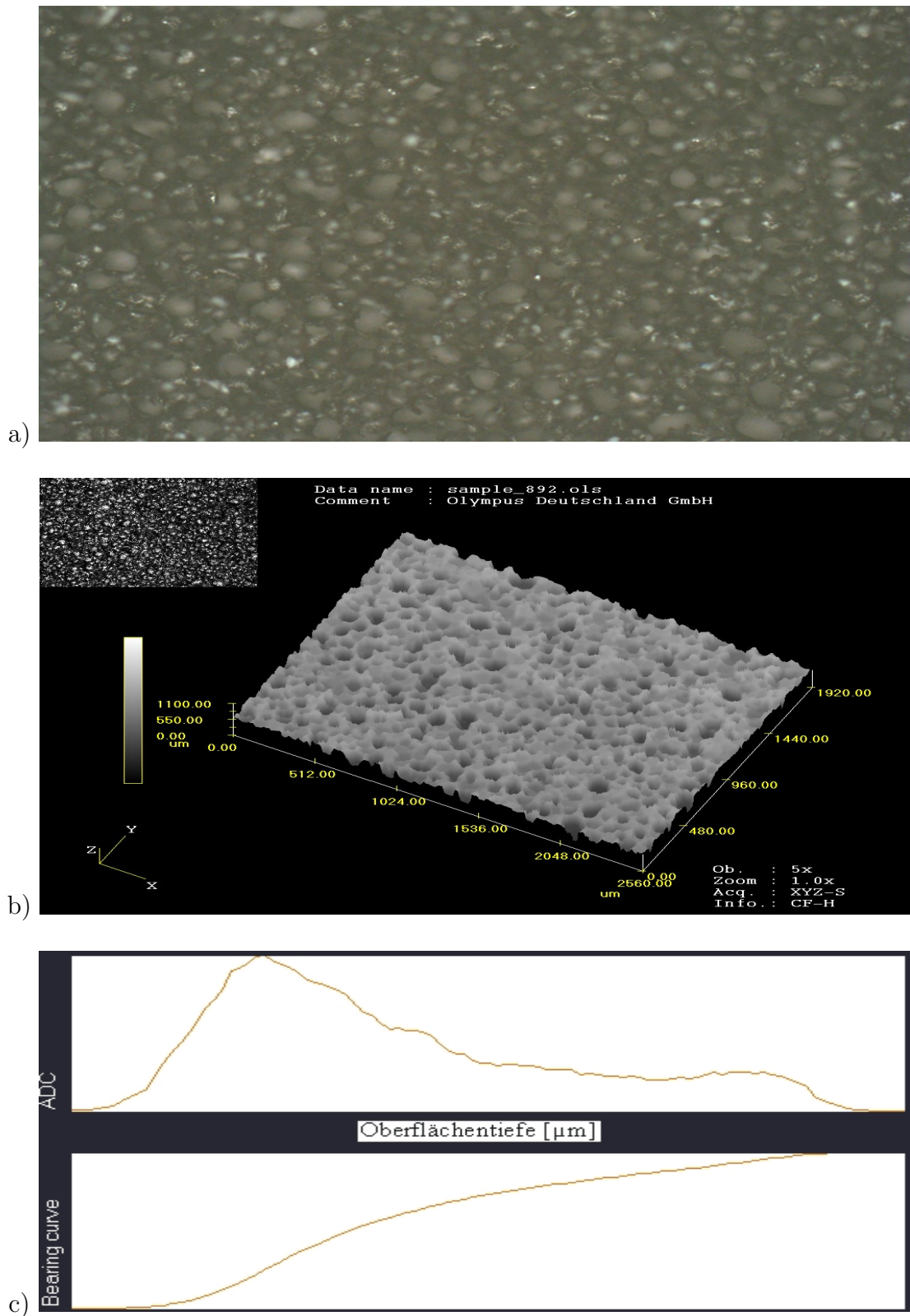


Abbildung 3.25: Tuchprobe K: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe.

wurde beobachtet, dass die Dichte- und Verteilungsfunktionen an den unterschiedlichen untersuchten Stellen einer Probe nur sehr geringfügig variieren.

Die Tuchproben J und K stammen von anderen Tuchtypen als die Proben A bis I. Während die Proben A bis I Fasertücher sind, wurden Proben J und K aus Porentüchern entnommen. Auf der zwei- und dreidimensionalen Aufnahme der Tuchprobe J sind kleine, gleichmäßig verteilte Poren mit unterschiedlichem Durchmesser und unterschiedlicher Tiefe zu sehen. Des Weiteren lassen sich ein paar wenige, eher ebene Bereiche erkennen. Die dazugehörige Dichte- und Verteilungsfunktion ist schmal. Bei der Dichtefunktion ist ebenfalls ein „mittiger“ Abknickpunkt erkennbar, in dem ein langer rechter abfallender Teil der Funktion beginnt. Auf der zwei- und dreidimensionalen Aufnahme der Tuchprobe K sind auch gleichmäßig verteilte Poren mit unterschiedlichem Durchmesser und unterschiedlicher Tiefe zu sehen, wobei die Durchmesser und Tiefen der Poren größer als bei der Tuchprobe J sind. Die Oberfläche erscheint inhomogener als bei Probe J. Es sind keine ebenen Bereiche sichtbar. Die dazugehörige Dichte- und Verteilungsfunktion ist sehr breit. Bei beiden Proben wurde nur eine geringfügige Variation der Dichte- und Verteilungsfunktionen der unterschiedlichen untersuchten Stellen beobachtet.

Zur Bestätigung und Verfeinerung der mit dem Mikroskop erhaltenen Aufnahmen wurde von den Tuchproben F und H sowie einer der Probe A ähnlichen Tuchprobe je eine REM-Aufnahme angefertigt. Die in Abbildung 3.26, 3.27 und 3.28 dargestellten REM-Aufnahmen lassen — wie erwartet — die gleichen Charakteristiken wie die Mikroskopaufnahmen erkennen.

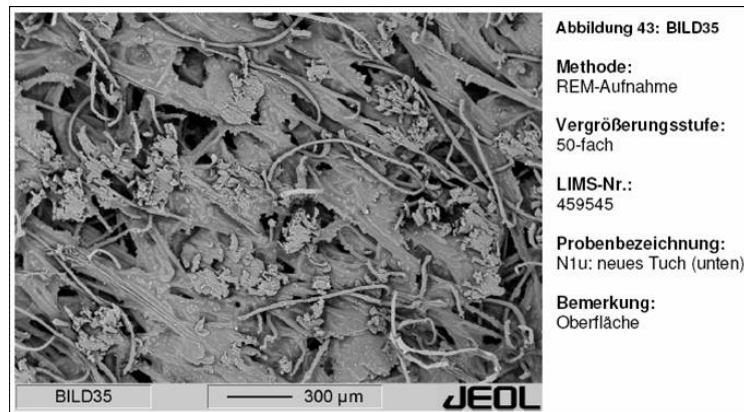


Abbildung 3.26: REM-Aufnahme der Oberfläche eines neuen Tuches (ähnlich Probe A).

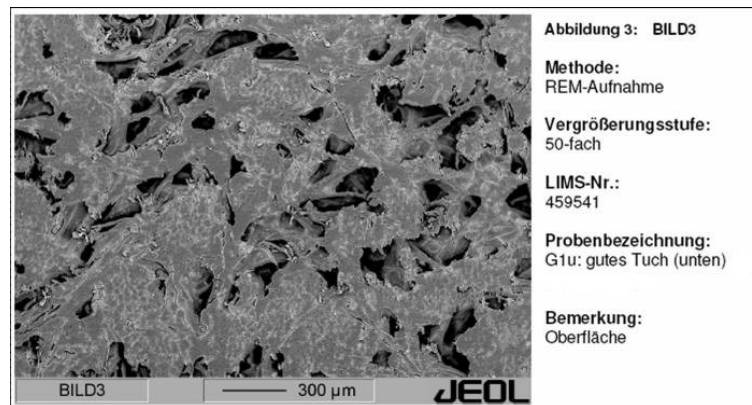


Abbildung 3.27: REM-Aufnahme der Oberfläche der Tuchprobe F.

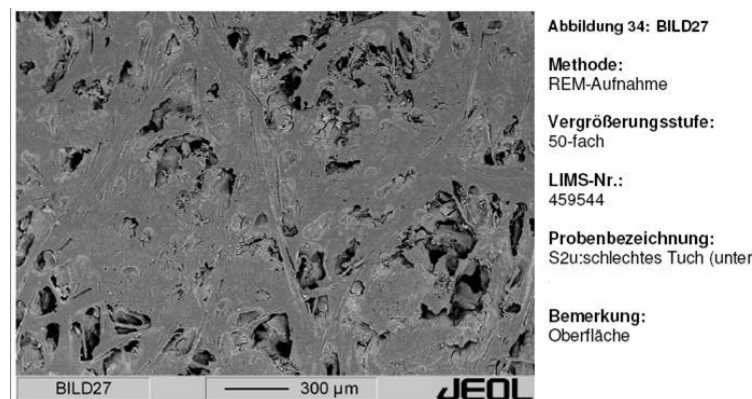


Abbildung 3.28: REM-Aufnahme der Oberfläche der Tuchprobe H.

3.2.3 Schlussfolgerungen

In diesem Kapitel werden nunmehr Schlussfolgerungen für das Poliertuch herausgestellt, die aus dem stochastischen Modell für eine konditionierte Poliertuchoberfläche aus Kapitel 3.2.1.3 und den experimentellen Ergebnissen aus Kapitel 3.2.2 resultieren.

Zunächst werden erstmals Beziehungen zwischen Konditionierparametern/Tuchstrukturparametern und der resultierenden Tuchoberfläche (resp. Tuchrauheit) anhand eines stochastischen Modells aufgezeigt. Des Weiteren wird ein bereits lange Zeit gesuchter Parameter angegeben, mit dem ein ideales Poliertuch charakterisierbar wird: die Dichtefunktion der Oberflächentiefe. Anhand dieses Parameters werden Kriterien dargestellt, die ein ideales Poliertuch erfüllen muss. Die Kriterien wurden durch die experimentellen Ergebnisse in 3.2.2.4 verifiziert.

Aus diesen Erkenntnissen werden sodann neue Ideen abgeleitet, wie eine ideale Poliertuchoberfläche konstruiert, hergestellt und erhalten werden kann.

Den Abschluss dieses Kapitels bildet die Beschreibung der Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer beim Polieren, die auf den neuen Erkenntnissen zur Poliertuchoberfläche aufbaut. Diese Beschreibung der Kontaktfläche wird bei der Modellierung des Abtragsprozesses in Kapitel 3.3 benötigt.

3.2.3.1 Beziehungen zwischen Konditionierparametern/Tuchstruktur und Tuchrauheit

In Kapitel 3.2.1.3 wurde ein Modell für die konditionierte Tuchoberfläche entwickelt. Dieses Modell ist durch vier Parameter gekennzeichnet: die die Struktur des Tuches beschreibenden Parameter V_V (Volumenanteil des Feststoffes) und λ_2 (Parameter der linearen Kontaktverteilung) sowie die den Konditionierprozess beschreibenden Parameter n (Zeit) und h (Konditionierelementtiefe).

Im Folgenden werden erstmals Beziehungen zwischen diesen Parametern und der Dichtefunktion der Oberflächentiefe herausgestellt, um Möglichkeiten der bewussten Gestaltung der Tuchoberfläche aufzuzeigen:

- Die Spitze der Dichtefunktion der Oberflächentiefe bildet sich am Punkt der Tiefe des Konditionierelementes h aus. Eine Veränderung der Tiefe h bewirkt eine horizontale Verschiebung der Spitze. Große h erzeugen einen großen Tuchabtrag, der jedoch die Lebenszeit eines Tuches verkürzt. Daher sind in der Praxis kleine Schnitttiefen h wünschenswert.
- Die Dauer des Konditionierens wird durch die Zeit n erfasst, die mit der Form des linken Teils der Dichtefunktion der Oberflächentiefe zusammenhängt. Längeres Konditionieren bewirkt einen steileren Anstieg dieses linken Funktionsteils. Wenn in diesem linken Teil der Funktion ein oder mehrere lokale Maxima zu sehen sind, dann gibt es entsprechend Irregularitäten auf der Tuchoberfläche. Um diese zu nivellieren, muss der Konditionierprozess länger angewendet werden.
- Der Tuchparameter λ_2 , der mit der linearen Kontaktverteilungsfunktion in Verbindung steht, enthält wichtige Informationen über die Porenverteilung. Wenn die Poren sehr klein mit geringer Variation sind, so ist λ_2 groß und der rechte abfallende Teil der Funktion ist kurz und steil; große Poren mit einem hohen Grad an Variabilität korrelieren mit einem langen rechten abfallenden Funktionsteil. Beide Extreme sind nicht zweckmäßig für den Polierprozess. Im ersten Fall ist das Tuch zu glatt, somit ist die Abtragsrate zu klein (da sich keine Abtragspartikel mehr im Tuch festsetzen können). Im zweiten Fall ist das Tuch zu rau, was zu große Abtragsschwankungen und somit eine raue Waferoberfläche zur Folge hat.
- Der Volumenanteil $1 - V_V$ der Poren ist eng verbunden mit der Höhe des Anfangs des rechten Teiles der Funktion bei der Tiefe h (in Abbildung 3.13 bei $f(5) = 0.18$), für große $1 - V_V$ beginnt der rechte abfallende Teil der Funktion an einem höheren Punkt, für kleine $1 - V_V$ an einem niedrigeren. Im Polierprozess sind sowohl zu große als auch zu kleine Werte für $1 - V_V$ nicht nützlich.

3.2.3.2 Kriterien für eine ideale Poliertuchoberfläche

An dieser Stelle wird zunächst zusammengefasst, wie eine ideale Poliertuchoberfläche beschaffen sein muss und wie sich diese Eigenschaften in der Dichtefunktion für die Oberflächentiefe äußern. Ideales Poliertuch bedeutet hier geringe Unebenheit der polierten Waferoberfläche bei konstant hoher Abtragsrate. Anhand der experimentellen Ergebnisse aus Kapitel 3.2.2.4 wird gezeigt, dass sich die entwickelten Qualitätsmerkmale

auf die Beurteilung von Poliertüchern anwenden lassen und in der Praxis bewahrheitet haben.

Folgende Kriterien erfüllt eine ideale Poliertuchoberfläche bzw. durch folgende Merkmale ist die Dichtefunktion der Oberflächentiefe eines idealen Poliertuches gekennzeichnet:

1. Eine ideale Poliertuchoberfläche weist einen hohen Grad an Homogenität auf. Das bedeutet, dass die Dichtefunktionen mehrerer untersuchter Stellen desselben Tuches nur geringfügig variieren.
2. Die Oberflächentiefen sind überwiegend gleich, was einer schmalen hohen Spitze in der Dichtefunktion entspricht.
3. Die Poliertuchoberfläche zeigt keine unregelmäßigen Erhöhungen, was aus einem steilen Anstieg zur Spitze im linken Teil der Dichtefunktion geschlussfolgert werden kann.
4. Es ist eine ausreichende Porosität als Speichervermögen für chemische Stoffe (Slurry) und zum Transport abpolierten Materials vorhanden. Dies entspricht dem „Abknickpunkt“ und dem Verlauf des rechten Teils der Funktion. Ist der „Abknickpunkt“ zu niedrig, können die chemischen Vorgänge nicht (mehr) ungehindert stattfinden und der Polierprozess „ermüdet“. Ist dieser Punkt zu hoch, ist die Rauheit des Tuches wiederum zu hoch, was zu einer erhöhten Rauheit der Waferoberfläche führt.

Es sei angemerkt, dass sich die Kriterien 1, 2 und 3 hauptsächlich auf die Unebenheit der polierten Waferoberfläche beziehen. Kriterium 4 enthält insbesondere eine Charakteristik für eine gute Abtragsrate.

Im Folgenden werden nun die oben genannten Kriterien anhand der empirischen Dichtefunktionen aus Kapitel 3.2.2.4 verifiziert. Dabei wird zunächst die Dichtefunktion mit den oben genannten Kriterien verglichen und daraus eine Beurteilung der Qualität des Poliertuches abgeleitet. Dieses Urteil wird sodann mit der real aufgetretenen Qualität verglichen.

Wie in Kapitel 3.2.2.4 angegeben variieren die Dichtefunktionen der Tuchproben A, B, C und D an unterschiedlichen Stellen auf der Tuchprobe in größerem Maße. Demzufolge ist anhand dieses Faktors davon auszugehen, dass es sich bei diesen Proben um

kein ideales Tuch bezüglich der Zielparameter handeln kann. Des Weiteren ist aufgrund der beobachteten Breite der Dichtefunktionen auch Kriterium 2 nicht erfüllt. Bei Tuchproben C und D, Abb. 3.17 und 3.18, ist ein Abknickpunkt ausgeprägt, der jedoch zu weit oben liegt. Gemäß der Theorie lautet demzufolge die Hypothese über die Polierqualität: „schlecht bezüglich Ebenheit des polierten Wafers“. Eine Interpretation der Dichtefunktion und ihrer Parameter bezüglich der Tuchoberfläche führt zur Aussage, dass die Oberflächentiefen sehr stark variieren. Dieses ist in den zwei- und dreidimensionalen Bildern der Tuchproben A, B, C und D bestätigend sichtbar. Aus Tabelle 3.2 kann nun die reale Polierqualität der Tücher entnommen werden. Die dortige Beurteilung stimmt mit der Hypothese überein.

Bei den Dichtefunktionen der Tuchproben E, F und G wurden in Kapitel 3.2.2.4 nur sehr geringfügige Veränderungen an unterschiedlichen Stellen auf der Tuchprobe beobachtet, womit Kriterium 1 erfüllt ist. Die jeweiligen Dichtefunktionen zeigen eine schmale hohe Spitze, einen steilen Anstieg von links und einen Abknickpunkt in mittlerer Höhe, in dem ein langer rechter abfallender Teil der Funktion beginnt. Es sind also auch die Kriterien 2 bis 4 erfüllt. Gemäß der Theorie lautet demzufolge die Hypothese über die Polierqualität: „gut bezüglich Ebenheit des polierten Wafers und der Abtragsrate“. Aus der Dichtefunktion und ihren Parametern lässt sich bezüglich der Poliertuchoberfläche ableiten, dass ein hoher Anteil gleicher Oberflächentiefen vorhanden ist und es keine unregelmäßigen Erhöhungen gibt. Dieses ist in den zwei- und dreidimensionalen Bildern der Tuchproben E, F und G bestätigend sichtbar. Des Weiteren ist eine gewisse Porosität als Speichervermögen für chemische Stoffe zu erkennen. Aus Tabelle 3.2 kann nun die reale Polierqualität der Tücher entnommen werden, die mit der Hypothese ebenfalls übereinstimmt.

Die Dichtefunktionen der Tuchproben H und I in Abb. 3.22 und 3.23 erfüllen zwar die Kriterien 1 bis 3, widersprechen jedoch dem Kriterium 4. Die jeweilige Dichtefunktion zeigt zwar eine schmale hohe Spitze und einen steilen Anstieg von links, jedoch der Abknickpunkt des rechten abfallenden Teils der Funktion liegt sehr weit unten. Gemäß der Theorie lautet demzufolge die Hypothese über die Polierqualität: „schlecht bezüglich der Abtragsrate“. Aus der Dichtefunktion und ihren Parametern lässt sich bezüglich der Tuchoberfläche ableiten, dass ein sehr hoher Anteil gleicher Oberflächentiefen vorhanden ist und es keine unregelmäßigen Erhöhungen gibt. Die Porosität ist jedoch sehr gering. In den zwei- und dreidimensionalen Bildern der Tuchproben H und I ist dies bestätigend sichtbar. Die Beurteilung der realen Polierqualität in Tabelle 3.2 stimmt also ebenfalls mit der aus der Theorie abgeleiteten Hypothese überein.

Die Proben A bis I stammen von Fasertüchern. Die Tuchproben J und K wurden nun von einem anderen Tuchtyp, dem Porentuch, entnommen. Die Dichtefunktion der Tuchprobe J in Abb. 3.24 erfüllt die Kriterien 1 bis 4, während die Dichtefunktion der Tuchprobe K in Abb. 3.25 dem Kriterium 2 widerspricht: Die Dichtefunktion des Tuches K ist durch eine sehr breite Verteilung gekennzeichnet. Gemäß der Theorie lautet demzufolge die Hypothese über die Polierqualität: „Tuchprobe J ist gut und Tuchprobe K ist schlecht bezüglich der Ebenheit des polierten Wafers“. Aus den Dichtefunktionen und ihren Parametern lässt sich ableiten, dass die Porosität bei beiden Tüchern ausreichend vorhanden ist. Bei Tuchprobe J ist sie jedoch deutlich größer und inhomogener ausgebildet. In den zwei- und dreidimensionalen Bildern der Tuchproben J und K ist dies bestätigend sichtbar. Aus Tabelle 3.2 kann die reale Polierqualität der Tücher entnommen werden. Die Beurteilung stimmt auch hier mit der Hypothese überein.

In allen Fällen hat sich gezeigt, dass die aus der Dichtefunktion abgeleitete Beurteilung des Tuches der Realität entsprochen hat. Des Weiteren wurde durch eine Verifizierung der Kriterien sowohl an Fasertüchern als auch an Porentüchern gezeigt, dass die Theorie auf unterschiedliche Tuchtypen anwendbar ist.

Es sei angemerkt, dass die bei Tuchprobe A beobachtete Bimodalität wahrscheinlich im Herstellprozess des Tuches begründet ist, bei dem mit Filz/Polyesterfasern und Polyurethan gearbeitet wird. Die Erforschung der Bimodalität wird nicht mehr im Rahmen dieser Arbeit vorgenommen, weil dies hier nicht zielführend ist. Der Schwerpunkt liegt auf der Beschreibung der idealen Tuchoberfläche.

Grenzwerte für den „Abknickpunkt“, d. h. für den Volumenanteil $1 - V_V$ der Poren, anzugeben bzw. vielmehr Abhängigkeiten zwischen $1 - V_V$ und der Rauheit der Waferoberfläche aufzuzeigen, erfordern ein grundlegendes Prozessverständnis, da dieser Grenzwert vom eingesetzten Slurry, Druck u. a. abhängig ist. Ansätze zur Modellierung dieses Zusammenhanges werden mithilfe der Betrachtungen aus Abschnitt 3.2.3.4 im Kapitel 3.3 dargestellt.

3.2.3.3 Konstruktion, Herstellung und Erhaltung einer idealen Poliertuchoberfläche

In diesem Abschnitt werden Ideen dargelegt, wie eine durch die Kriterien in 3.2.3.2 charakterisierte ideale Poliertuchoberfläche hergestellt und erhalten (resp. konditioniert) werden kann.

Die Bearbeitung der Tuchoberfläche kann auf dreierlei Weise geschehen: mechanisch, chemisch oder aus einer Kombination von beiden. Für die Optimierung der Tuchoberfläche ist es zunächst notwendig, den separaten Einfluss der mechanischen sowie der chemischen Einzelkomponente zu kennen.

Mit mechanischen Methoden wird der linke Teil der Dichtefunktion beeinflusst. Dies bedeutet, dass unregelmäßige Erhöhungen wie z. B. überstehende Fasern beseitigt und neue, sehr kleine Mikrostrukturen eingearbeitet werden. Vom Waferhersteller wird als mechanische Methode das Konditionieren eingesetzt. Die Tuchhersteller verwenden häufig das sogenannte „Buffing“, ein planparalleles Schleifen der Tuchoberfläche, worauf hier nicht weiter eingegangen werden soll. Gemäß den Erläuterungen in Abschnitt 3.2.3.1 kann über die Parameter Zeit und Konditionierelement der linke Teil der Verteilung verändert werden.

Chemische Verfahren können eingesetzt werden, um den rechten Teil der Dichtefunktion (und damit die Struktur der Tuchoberfläche) zu beeinflussen. Abbildung 3.26 zeigt die REM-Aufnahme eines neuen Tuches. Es sind deutlich einzelne Fasern und bereits verfüllte Bereiche zu sehen. Bei diesem Tuch könnten durch Einsatz von Chemie (z. B. Kieselöl und Silizium) Fasern an die Oberfläche gebunden und weitere Bereiche „verfüllt“ werden.

Die Kombination aus Mechanik und Chemie wird allerdings wie in vielen anderen Anwendungen das beste Ergebnis liefern. Mit rein mechanischer Bearbeitung können letztlich nur überstehende Fasern beseitigt und „Furchen“ in die Oberfläche eingearbeitet werden, mit rein chemischer Bearbeitung werden lediglich Stoffe gebildet bzw. gelöst. Erst das Zusammenspiel zwischen Entfernen von überstehenden Fasern und „Verfüllen“ von Poren wird eine ideale Tuchoberfläche erzeugen.

Aus der Theorie kann man ableiten, dass bei Tuch H gegenüber Tuch F der Volumen-

teil V_V des Feststoffes zugenommen haben muss. Dies wird auch in den in den Abbildungen 3.27 und 3.28 dargestellten REM-Aufnahmen der Tuchproben bestätigt. Es hat eine Art „Verfüllung“ der Poren stattgefunden. (Mithilfe der dargestellten Theorie kann auch der Verfüllungsgrad in solchen REM-Aufnahmen mittels eindeutiger Werte beschrieben werden). Die Verfüllung der Poren entsteht durch Einlagerung von Silikateilchen während des Polierprozesses. Bei einer zu starken Verfüllung kann der Stofftransport im Polierprozess nicht länger gewährleistet werden, das Tuch ist zu glatt und damit die mittlere Abtragsrate zu niedrig. Einer zu großen Verfüllung kann wieder mit einer Kombination aus chemischen und mechanischen Mitteln begegnet werden. Beispielsweise können mit Kaliumhydroxid oder Kaliumkarbonat die eingelagerten Silikateilchen gelöst werden (vgl. Ihler, 1979). Durch mechanischen Einfluss (z. B. eine Walze mit Druck) müssen dann aber die gelösten Silikate (wie bei einem Schwamm das Wasser) aus den Poren herausgearbeitet werden. Erst dann erhöht sich wieder der Porenanteil der Tuchoberfläche.

3.2.3.4 Kontaktfläche als Komplement des Booleschen Modells

Aufgrund der in den vorangegangenen Kapiteln erlangten Erkenntnisse kann nunmehr auf die Modellierung der Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer beim Polierprozess geschlussfolgert werden.

Ein ideales Poliertuch ist wie bereits dargestellt durch einen überwiegenden Teil gleicher Oberflächentiefen gekennzeichnet. Der linke Teil der Dichtefunktion sollte steil sein, ist jedoch nicht senkrecht, d. h. es existieren noch ein paar wenige Erhöhungen auf der Tuchoberfläche. Diese Erhöhungen werden durch den Druck im Polierprozess eingeebnet und verringern eventuell geringfügig die Porosität. Dieser Anteil ist jedoch in jedem Fall vernachlässigbar klein. Der rechte Teil der Funktion spiegelt die Porosität wider, die nicht zu groß und nicht zu klein sein sollte.

Letztendlich ist damit die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer vereinfacht als eine Ebene mit „Löchern“ zu interpretieren (vgl. Abb. 3.29). Die „Löcher“ entsprechen den Poren. Die Poren können analog Kapitel 3.2.1.1 durch ein Boolesches Modell dargestellt werden und auch beim Querschnitt durch das Tuch bilden dann die Leerstellen ein Boolesches Modell. Somit muss die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer beim Polierprozess als Komplement des Booleschen Modells modelliert werden, wobei der Vo-

lumenanteil $1 - V_V$ der Poren und die lineare Kontaktverteilungsfunktion mit Parameter λ_2 kennzeichnende Parameter sind.

Diese Herangehensweise ist völlig konträr zur bisherigen Betrachtung der Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer in der Literatur (vgl. Abb. 3.30), bei der die Kontaktfläche ein Boolesches Modell bildet. Anhand des stochastischen Modells für eine konditionierte Tuchoberfläche sowie der experimentellen Ergebnisse und der Schlussfolgerungen wird jedoch plausibel, dass die in dieser Arbeit neu verfolgte Betrachtungsweise in jedem Falle realistischer ist. In Kapitel 3.3 wird bei der Modellierung des Abtragsprozesses zunächst der Ansatz aus der Literatur verfolgt, um dann die Änderungen mit der neuen Betrachtungsweise aufzuzeigen.

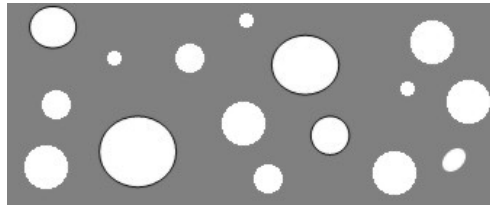


Abbildung 3.29: Neuer Modellansatz in dieser Arbeit für die Kontaktfläche (grau) zwischen Wafer und Tuch: das Komplement eines Booleschen Modells. Einzelne Porenflächen sind Kreisflächen und die Kontaktfläche ist das Komplement der Porenflächen.

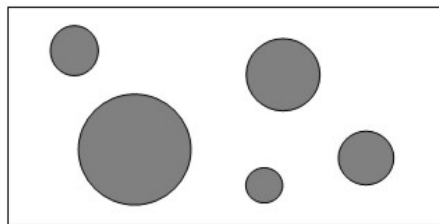


Abbildung 3.30: In der Literatur zu findendes Modell für die Kontaktfläche (grau) zwischen Wafer und Tuch: das Boolesche Modell. Das Tuch wird als Ebene mit „runden Buckeln“ modelliert. Wird der Wafer nun auf das Tuch gedrückt, ergibt sich als Kontaktfläche eine Vereinigung von Kreisflächen.

3.3 Abtragsprozess und resultierende Waferoberfläche

In diesem Kapitel werden drei verschiedene stochastische Modelle zur Beschreibung des Abtragsprozesses vorgestellt und deren abstrakte Parameter (z. B. Liniendichte, Wirkungsprofil, Intensität) auf reale physikalische Einflussparameter (z. B. Druck, Relativgeschwindigkeit, Tucheigenschaften) überführt. Die Modelle werden anhand experimenteller Ergebnisse verifiziert, um letztlich ein tatsächlich den chemisch-mechanischen Polierprozess von Siliziumwafern beschreibende stochastische Modell zu bestimmen. Mit diesem Modell können sodann erstmalig Zusammenhänge zwischen Ebenheit der Waferoberfläche und Tuchrauheit bzw. anderen Prozessparametern durch eine Theorie begründet werden. Weiterhin ergeben sich neue Erkenntnisse, wie sich eine negative Wirkung durch Veränderung *eines* CMP-Einflussparameters durch Veränderung anderer Einflussparameter egalalisieren lässt.

3.3.1 Modelle für den Abtragsprozess

Die drei verschiedenen stochastischen Modelle werden ausgehend von den durchgeführten vertiefenden Betrachtungen zu den mathematischen Modellen in Kapitel 2 nun durch das Herstellen einer Verbindung zwischen abstrakten mathematischen Parametern und realen physikalischen Parametern erstmals auf den CMP-Prozess anwendbar gemacht. Bei der Überführung der Parameter halfen die Arbeiten von Luo und Dornfeld (2001), Zhao und Chang (2002), Jeng und Huang (2005) und Borucki (2002), in denen jeweils unterschiedliche Ansätze verwendet wurden. Es werden die Gemeinsamkeiten und Unterschiede der Ansätze sowie sich daraus ergebende neue Ansätze herausgearbeitet. Sodann kann mithilfe der stochastischen Modelle nicht mehr nur — wie bisher — der mittlere Abtrag, sondern auch die Streuung des Abtrags (und somit die Unebenheit der polierten Oberfläche) als auch die Korrelation zwischen dem Abtrag an zwei Punkten auf der Waferoberfläche angegeben werden.

3.3.1.1 Grundlegende Annahmen

In der Modellierung des Abtragsprozesses wird davon ausgegangen, dass vorhandene Unebenheiten der Ausgangswaferoberfläche in einer kurzen Anfangsphase der Politur

beseitigt werden. Dies wird durch folgende Betrachtungen plausibel: Durch die rein chemische Komponente im Prozess wird gleichermaßen an allen Stellen auf dem Wafer Material an- bzw. abgelöst. Der kombinierte chemisch-mechanische Abtrag findet nun zuerst an erhöhten Stellen auf der rauen Ausgangswaferoberfläche statt. Die chemische Komponente an den tieferen Stellen wirkt viel langsamer als der chemisch-mechanische Abtrag an den erhöhten Stellen (vgl. Tabelle 3.1), sodass diese Erhöhungen viel schneller abgetragen als tiefere Stellen vorangetrieben werden. Beide Abtragskomponenten treffen sich nach kurzer Zeit in einer Ebene. Der Vorstellung nach ist diese Ebene vereinfacht eine „glatte“ Waferoberfläche. Der Abtragsprozess endet jedoch nicht hier, sondern wird fortgesetzt. Die Unebenheiten der Endwaferoberfläche sind dann durch den Prozess bestimmt und können unabhängig von der Eingangsgeometrie des Wafers betrachtet werden.

Bei der Modellierung wird nun die kurze Anfangsphase, in der die Unebenheiten der Ausgangswaferoberfläche beseitigt werden, vernachlässigt. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Untersuchung, wie sich die durch den Polierprozess hervorgerufenen Unebenheiten (Nanometerskala) ergeben bzw. beeinflussen lassen. Daher wird von einem „glatten“ Wafer als Eingangsprodukt ausgegangen.

Langwellige Verformungen des Wafers vor dem CMP-Prozess werden im Polierprozess durch den Druck flach gedrückt und verändern sich durch CMP nicht (Parameter wie bow = Biegung und warp = Welligkeit).

Der Polierprozess wird im hier betrachteten Bereich nach der kurzen Anfangspolitur als zeitlich stationär angenommen, d. h. in jeder Zeiteinheit wird die gleiche Menge Material abgetragen.

3.3.1.2 Beschreibung des Abtragsprozesses mittels eines Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeldes

In diesem Abschnitt wird erstmalig erläutert, wie der Abtragsprozess mit einem Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld (vgl. Kapitel 2.2.2) beschrieben werden kann. Das Poissonsche Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld ist durch zwei Parameter gegeben: die Liniendichte des Poisson-Geradenprozesses und das Wirkungsprofil. Diese beiden Modellparameter werden mithilfe der Arbeiten von Luo und Dornfeld (2001), Zhao und Chang

(2002), Jeng und Huang (2005) auf physikalische CMP-Einflussparameter überführt. Das stochastische Modell ermöglicht es, nicht mehr nur — wie bisher — eine Formel für den mittleren Abtrag, sondern auch für die Streuung des Abtrags sowie für die Korrelation zwischen dem Abtrag an zwei Punkten auf der Waferoberfläche anzugeben.

Bei der Beschreibung wird wie folgt vorgegangen:

- a) Definition und physikalische Grundlage des Modells
- b) Berechnung der Liniendichte des Poisson-Geradenprozesses mittels der CMP-Einflussparameter
 - b1) Kontaktflächenanteil A_A zwischen Wafer und Tuch
 - b1.i) Das Tuch als Ebene mit Erhöhungen („Buckeln“)
 - b1.ii) Das Tuch als Ebene mit Vertiefungen („Löchern“)
 - b2) Intensität λ_P der am Abtrag beteiligten Partikel pro Flächeneinheit des Tuches
 - b2.i) Der Ansatz von Zhao und Chang (2002)
 - b2.ii) Der Ansatz von Jeng und Huang (2005)
 - b2.iii) Der Ansatz von Luo und Dornfeld (2001)
 - b2.iv) Schlussfolgerung für die Intensität
- c) Berechnung des Wirkungsprofils mittels der CMP-Einflussparameter
 - c1) Zwei Ansätze
 - c2) Schlussfolgerung für das Wirkungsprofil
- d) Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche.

zu a): Definition und physikalische Grundlage des Modells

Das Modell des Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeldes basiert auf dem Ansatz, dass die in der Tuchoberfläche eingedrückten Slurry-Partikel aufgrund des Druckes und der Relativbewegung „Mikrofurchen“ auf der Waferoberfläche erzeugen und somit mechanisch Material abtragen (Abb. 3.31). Die Tuchoberfläche dient als Träger der Partikel. Die nicht in die Tuchoberfläche eingedrückten Partikel bewegen sich weiterhin frei im Slurry. Die bei der freien Bewegung gelegentliche Berührung der Waferoberfläche und der damit

verbundene geringfügige Abtrag sind vernachlässigbar (vgl. Luo und Dornfeld, 2001), da der Anteil am Gesamtabtrag verschwindend gering ist. Die Partikel sind näherungsweise kugelförmig und haben zufällige Durchmesser (vgl. Kapitel 3.3.2.1). Es sei angemerkt, dass die Größe der Partikel im Nanometerbereich liegt, hingegen die Rauheit des Tuches im Mikrometerbereich.

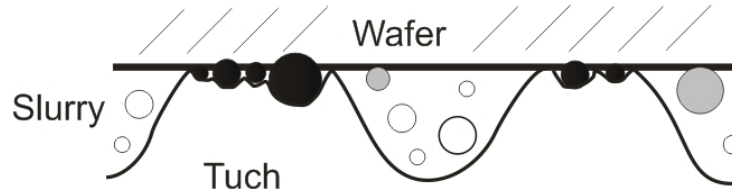


Abbildung 3.31: Ein Teil der Partikel im Slurry wird durch den Druck in die Tucherhöhlungen eingedrückt (schwarze Kreise). Diese Partikel bewirken den Materialabtrag. Der restliche Teil der Partikel bewegt sich weiterhin frei im Slurry (weiße und graue Kreise). Bei der freien Bewegung kann es gelegentlich zur Berührung der Waferoberfläche kommen (graue Kreise). Durch diese Berührung wird vernachlässigbar wenig Material abgetragen. Da davon ausgegangen wird, dass nur große Partikel Abtrag bewirken, sind auch nur diese dargestellt.

Die hier vorliegende mikroskopische Betrachtungsweise ermöglicht es, insbesondere den mechanischen Einfluss von Slurry-Eigenschaften (Konzentration, Größe und Form der Partikel) zu untersuchen.

Bei Überlagerung von Mikrofurchen, z. B. an Kreuzungspunkten oder bei parallelem Verlauf, addieren sich die Abtragstiefen. Diese Annahme ist plausibel, da die die Mikrofurchen erzeugenden Partikel Durchmesser im Nanometerbereich haben, aber mit dem hier zugrunde liegenden CMP-Prozess Abtragstiefen im Mikrometerbereich erreicht werden.

Die Abtragstiefe ist von der Anzahl und der Form der Mikrofurchen abhängig. Für die Modellierung wird angenommen, dass die Zentren der Mikrofurchen (vgl. Abb. 3.32) näherungsweise Geraden sind. Das Querschnittsprofil der Mikrofurchen wird durch eine zufällige Funktion f_Q beschrieben.

Die Menge der Geraden bildet einen Geradenprozess Ψ_P . Der Geradenprozess wird als

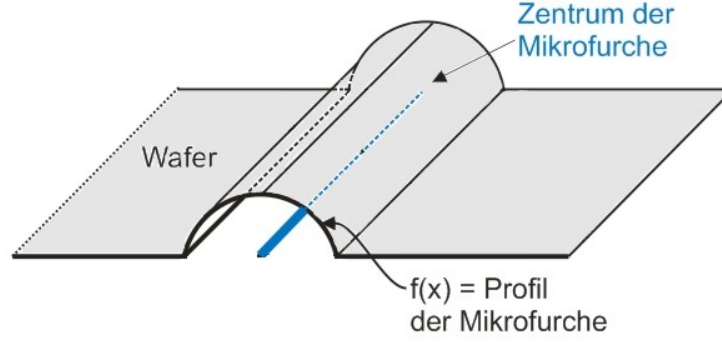


Abbildung 3.32: Der Abtrag wird mechanisch durch Mikrofurchen in der Waferoberfläche erzeugt. Das Zentrum einer Mikrofurche ist in der Abbildung durch eine blaue, teilweise gestrichelte Linie dargestellt. Für die Modellierung wird angenommen, dass die Zentren der Mikrofurchen näherungsweise Geraden sind.

stationär (=homogen) und isotrop angenommen, d. h. die Mikrofurchen haben kein bestimmtes Gebiet und keine bestimmte Richtung, in dem bzw. in der sie bevorzugt auftreten. Weiterhin wird davon ausgegangen, dass die Mikrofurchen rein zufällig verteilt sind, sodass der Poisson-Geradenprozess ein geeignetes Modell zur Beschreibung der Menge der Mikrofurchenzentren ist. Durch die Autorin wird erstmals der Poisson-Geradenprozess als Modell für die Mikrofurchenzentren verwendet und anhand der Arbeit von Tso u. a. (2001) im Anhang A statistisch verifiziert.

Die polierte Waferoberfläche kann also nach den obigen Ausführungen als ein (Teil eines) Poissonsches(n) Geraden-Shot-Noise-Feld(es) $\{Z_t(\mathbf{x})\}$ modelliert werden, wobei $\mathbf{x}$ einen Punkt auf der Waferoberfläche bezeichnet. $Z_t(\mathbf{x})$ ist die erreichte Oberflächentiefe des Wafers am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t mit

$$Z_t(\mathbf{x}) = \sum_{l_i \in \Psi_P} f_Q(d_1(\mathbf{x}, l_i)), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

wobei $\Psi_P = \{l_i\}$ die Menge der Zentrumsgeraden der Mikrofurchen, f_Q das Querschnittsprofil der Mikrofurchen und d_1 eine Funktion ist, die den Abstand des Punktes $\mathbf{x}$ zur Geraden l_i angibt (vgl. Kapitel 2.3.1.1). Die Menge Ψ_P ist ein Poisson-Geradenprozess mit Liniendichte L_A und $f_Q : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ eine beliebige, nichtnegative, messbare Funktion.

Das Koordinatensystem ist so gewählt, dass der Anfangswert der Waferoberflächentiefe $Z_0(\mathbf{x}) \equiv 0$ ist. Der Polierprozess erhöht die Tiefe, sodass $\{Z_t(\mathbf{x})\}$ nichtnegativ wird. Da

ein homogenes Zufallsfeld angenommen wird, ist die eindimensionale Verteilungsfunktion des Zufallsfeldes

$$F_t(z) = P(Z_t(\mathbf{x}) \leq z)$$

unabhängig vom Punkt $\mathbf{x}$. In den folgenden Betrachtungen wird $\mathbf{x}$ fixiert und die Notation vereinfacht: $Z_t = Z_t(\mathbf{x})$.

Um nun physikalische Informationen über den Abtrag bzw. die polierte Waferoberfläche mithilfe der Formeln des Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes aus Kapitel 2.3.1 zu erhalten, werden im Folgenden die kennzeichnenden Parameter des Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes, die Liniendichte L_A und die Funktion f_Q auf CMP-Einflussparameter überführt.

zu b): Berechnung der Liniendichte des Poisson-Geradenprozesses mittels der CMP-Einflussparameter

Wie oben beschrieben, werden die Zentrumslinien der Mikrofurchen durch einen stationären und isotropen Poisson-Geradenprozess Ψ_P (vgl. Kapitel 2.1.3.5) modelliert. Dabei ist Ψ_P vollständig durch die Liniendichte L_A [$1/\mu\text{m}$], d. h. durch die mittlere Gesamtlänge der Geradenbruchstücke von Ψ_P in einem Gebiet vom Flächeninhalt 1, charakterisiert.

Die Liniendichte L_A ist in der gegebenen Situation abhängig von der mittleren Anzahl der Mikrofurchen pro Flächeneinheit (FE) des Wafers und ihrer mittleren Länge pro Zeiteinheit. Die mittlere Anzahl der Mikrofurchen pro FE ergibt sich aus:

- der mittleren Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer pro FE des Wafers, dem sogenannten Kontaktflächenanteil A_A ,
- der mittleren Anzahl der am Abtrag beteiligten Partikel pro FE des Tuches, der Intensität λ_P und
- der Zeit t .

Die mittlere Länge der Mikrofurchen ist über die Relativgeschwindigkeit v gegeben.

Es gilt also für die Liniendichte

$$L_A = A_A \cdot \lambda_P \cdot v \cdot t, \tag{3.7}$$

wobei

L_A	...	Liniendichte [$1/\mu\text{m}$] des Poisson-Geradenprozesses
A_A	...	Kontaktflächenanteil zwischen Wafer und Tuch
λ_P	...	Intensität der am Abtrag beteiligten Partikel pro FE des Tuches [$1/\mu\text{m}^2$]
v	...	Relativgeschwindigkeit [$\mu\text{m}/\text{s}$]
t	...	Zeit [s] bezeichnet.

Die Zeit t und die Relativgeschwindigkeit v werden als gegeben angenommen. Damit verbleiben für die weiteren Betrachtungen zwei Parameter, die im Folgenden in zwei separaten Abschnitten, b1) und b2), näher beleuchtet werden sollen.

zu b1): Kontaktflächenanteil A_A zwischen Wafer und Tuch

Bei der Bestimmung des Kontaktflächenanteils A_A werden die zwischen Wafer und Tuch befindlichen Partikel ignoriert, da die Partikelgröße viel kleiner als die Rauheit des Tuches ist. Es wird also angenommen, dass der ausgeübte Druck q_0 vorerst komplett auf das Tuch wirkt.

Es werden nunmehr zwei entgegengesetzte Wege zur Überführung des Kontaktflächenanteils auf CMP-Einflussparameter dargestellt, b1.i) und b1.ii). Obwohl in Kapitel 3.2.3.4 bereits einer dieser Wege als der realistischere für den hier betrachteten Prozess herausgearbeitet wurde, wird hier dennoch der bisher in der Literatur zu findende Ansatz erläutert und mathematisch modelliert. In zukünftigen Polierprozessen kann auch dieses Modell seine Berechtigung haben. Weiterhin wird im mathematischen Modell eine Korrektur der vorhandenen Modelle vorgenommen, in denen fälschlicherweise Überlappung von Kontaktgebieten ausgeschlossen wurde.

zu b1.i) Das Tuch als Ebene mit Erhöhungen („Buckeln“)

Dieser Weg basiert auf Ansätzen von Luo und Dornfeld (2001), Zhao und Chang (2002) und Jeng und Huang (2005). Das Tuch wird hier als Ebene mit Erhöhungen („Buckeln“) beschrieben (siehe Abb. 3.33 und 3.30). Diese Betrachtung führt dazu, die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer als ein Boolesches Modell mit Kreisen zu beschreiben. Zunächst wird ein ihren Annahmen entsprechendes Modell für die Tuchoberfläche angegeben, um danach auf den Kontaktflächenanteil zu schließen.

Die Tuchoberfläche wird analog zu Kapitel 3.2.1.2 als homogenes (stationäres) und ergo-

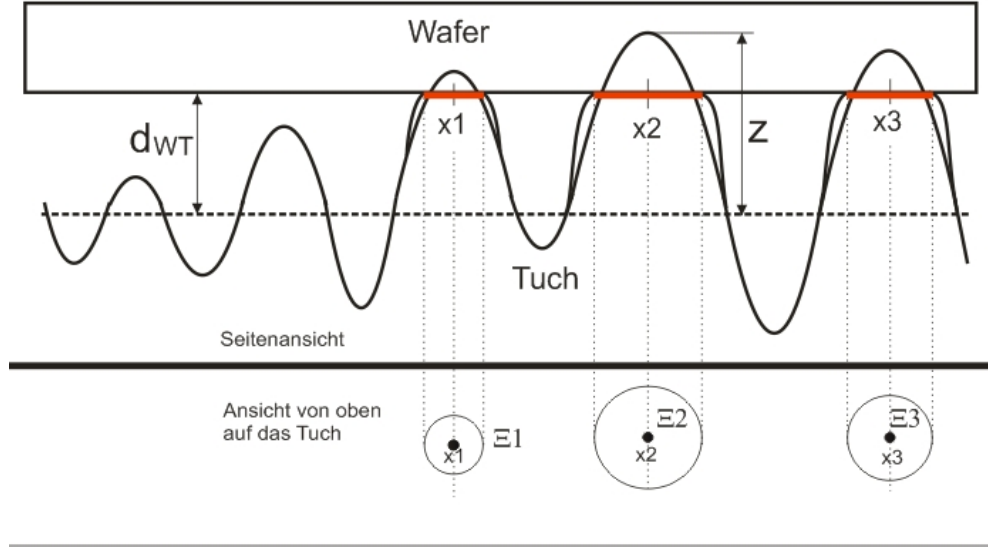


Abbildung 3.33: Seitenansicht: Ein ebener Wafer in Kontakt mit einer rauen Tucheoberfläche (Ausschnitt). Der Abstand zwischen Wafer und mittlerer Tuchebeine (gestrichelte Linie) wird mit d_{WT} bezeichnet, die Oberflächenhöhe des Tuches am Ort $\mathbf{x}$ mit z . Eine Tucherhöhung, die höher als d_{WT} ist, erzeugt eine Kontaktfläche zwischen Wafer und Tuch. Das Zentrum dieser Kontaktfläche wird mit $\mathbf{x}_j$ bezeichnet. In obiger Abbildung gibt es drei Kontaktflächen mit den Zentren $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$ und $\mathbf{x}_3$. Die Größe der einzelnen Kontaktflächen ist abhängig von den Materialeigenschaften und der betrachteten Verformung. Der Durchmesser der Kontaktfläche ist hier rot eingezeichnet. Draufsicht: Die drei dargestellten Kontaktflächen $\mathbf{x}_1 + \Xi_1$, $\mathbf{x}_2 + \Xi_2$, $\mathbf{x}_3 + \Xi_3$ sind von oben betrachtet Kreise mit unterschiedlichen Radien. Ihre Vereinigung ergibt die Kontaktfläche A für den hier gezeigten Ausschnitt.

disches Zufallsfeld $\{Z(\mathbf{x})\}$ modelliert, wobei $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ die Position auf dem Tuch darstellt. $Z(\mathbf{x})$ repräsentiert die Oberflächenhöhe des Tuches im Punkt $\mathbf{x}$. Es wird nun angenommen, dass sich die raue Tucheoberfläche aus vielen verschiedenen Tucherhöhungen zusammensetzt. Die Zentren der Tucherhöhungen seien rein zufällig verteilt. Daher können die Zentren durch einen Poisson-Prozess Φ_T mit Intensität η modelliert werden. Pro Flächeneinheit gibt es dann im Mittel η Zentren von Tucherhöhungen.

Die Form und Größe der Tucherhöhungen kann durch eine zufällige Funktion $f_T(\mathbf{x})$, $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ beschrieben werden. Für jedes Zentrum $\mathbf{x}_i$ einer Tucherhöhung i wird eine Realisierung $f'_{T_i}(\mathbf{x})$ der zufälligen Funktion erzeugt. Der Ursprung des der zufälligen Funktion

zugrunde liegenden Koordinatensystems wird in den Punkt $\mathbf{x}_i$ verschoben, die resultierende Funktion sei mit $f'_{T_{\mathbf{x}_i}}(\mathbf{x})$ bezeichnet. Bei Überlappung zweier Funktionen $f'_{T_{\mathbf{x}_i}}(\mathbf{x})$ und $f'_{T_{\mathbf{x}_j}}(\mathbf{x})$ an einem Punkt $\mathbf{x}$ wird das Supremum der beiden Funktionswerte gebildet.

Mit diesen Annahmen und Modellierungen kann die Tucherfläche $\{Z(\mathbf{x})\}$ wie folgt definiert werden:

$$Z(\mathbf{x}) = \sup_{\mathbf{x}_i \in \Phi_T} \{f'_{T_{\mathbf{x}_i}}(\mathbf{x})\}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

mit

- $\mathbf{x}$... Position auf dem Tuch
- $Z(\mathbf{x})$... Oberflächenhöhe des Tuches im Punkt $\mathbf{x}$
- Φ_T ... Poisson-Prozess der Zentren der Tucherhöhungen mit Intensität η
- $f'_{T_{\mathbf{x}_i}}(\mathbf{x})$... in den Punkt $\mathbf{x}_i$ verschobene Realisierung der zufälligen Funktion $f_T(\mathbf{x})$,
die zur Formbeschreibung der Tucherhöhung i dient.

So definierte Zufallsfelder nennt man Boolesche Funktion (vgl. Kapitel 2.2.1).

Nun wird über den Wafer Druck auf die Tucherfläche $\{Z(\mathbf{x})\}$ und somit die Tucherhöhungen ausgeübt. Im Folgenden wird zunächst eine einzelne Tucherhöhung betrachtet.

Eine Tucherhöhung und der Wafer berühren sich zunächst in einem einzelnen Punkt. Unter weiterer Belastung verformt sich die Tucherhöhung (linear-elastisch) in der Umgebung dieses ersten Berührungspunktes so, dass aus dem Punkt ein Berührungsgebiet/eine Kontaktfläche wird. Diese Kontaktfläche ist eben und gegenüber den Abmessungen von Tucherhöhung und Wafer sehr klein. Dabei wird die geringfügig beim Kontakt zwischen Tucherhöhung und Wafer entstehende Reibung vernachlässigt. Im Folgenden wird weiterhin angenommen, dass jede Tucherhöhung am oberen Ende rund mit einem konstanten Radius R ist. Weiterhin soll sich das Tuch unter Belastung ausschließlich elastisch verformen. Unter all diesen genannten Voraussetzungen kann die Form und Größe der Kontaktfläche zwischen jeder einzelnen Tucherhöhung und dem Wafer durch die Hertz-Theorie (vgl. Johnson, 1985, Kapitel 4) beschrieben werden.

Da die einzelne Tucherhöhung mit Radius R_K und der Wafer als homogen und isotrop betrachtet werden, ist nach Hertz die Kontaktfläche zwischen einer einzelnen Tucherhöhung und dem Wafer ein Kreis mit Radius r . Die Kontaktfläche A_r ist demzufolge eine zufällige Menge, die sich durch Vereinigung von Kreisflächen ergibt. Die Berechnung

des Kreistradius r wird im Anhang B erläutert. Die Radien sind im Allgemeinen für die einzelnen Kontaktflächen unterschiedlich.

Die Zentren der Tucherhöhlungen bilden laut Annahme einen Poisson-Prozess Φ_T mit Intensität η . Wenn alle Tucherhöhlungen groß genug sind, um Kontakt zum Wafer zu bekommen, sind die Zentren der Kontaktkreise gleich den Zentren der Tucherhöhung. Falls nicht alle Tucherhöhlungen den Wafer erreichen, ist die Anzahl der Zentren der Kontaktkreise kleiner. Es kommt zu einer Verdünnung des ursprünglichen Poisson-Prozesses Φ_T . Da eine Verdünnung eines Poisson-Prozesses wieder ein Poisson-Prozess ist (vgl. Stoyan, 1995, S. 147 ff.), bilden die Zentren der Kontaktkreise ebenfalls einen Poisson-Prozess, im Folgenden Φ_{T_v} genannt. Die Intensität $\eta_{\Phi_{T_v}}$ dieses Poisson-Prozesses Φ_{T_v} ist abhängig von den Materialeigenschaften, dem wirkenden Druck q_0 und dem Zufallsfeld $\{Z(\mathbf{x})\}$.

Die reale Kontaktfläche A_r kann nach den obigen Ausführungen als Boolesches Modell mit Kreisen modelliert werden:

$$A_r = \bigcup_{\mathbf{x}_j \in \Phi_{T_v}} (\mathbf{x}_j + b(o, r_j)),$$

mit

A_r	...	reale Kontaktfläche
$\mathbf{x}_j$	...	Zentrum eines Kontaktkreises
Φ_{T_v}	...	Poisson-Prozess der Zentren der Kontaktkreise mit Intensität $\eta_{\Phi_{T_v}}$
$b(o, r_j)$	...	Kontaktkreis mit Radius r_j .

Für den Flächenanteil je Flächeneinheit eines Booleschen Modells mit Kreisen gilt bekanntlich (Stoyan u. a., 1995):

$$A_A = 1 - \exp(-\eta_{\Phi_{T_v}} \mathbf{E}(\pi r_0^2)), \quad (3.8)$$

wobei $\eta_{\Phi_{T_v}}$ die Intensität des Poisson-Prozesses Φ_{T_v} und $\mathbf{E}(\pi r_0^2)$ der mittlere Flächeninhalt des typischen Kontaktkreises $b(o, r_0)$ ist.

Für die Berechnung des Kontaktflächenanteils zwischen Wafer und Tuch müssen also die Parameter $\eta_{\Phi_{T_v}}$ und r_0 bestimmt werden. Dafür existieren unterschiedliche Ansätze, die im Folgenden analysiert werden. In Tabelle 3.3 seien zunächst Vorgehensweisen aus verschiedenen Artikeln vergleichend dargestellt, bevor weiterführende Ansätze aufgezeigt werden.

Den einfachsten Ansatz verfolgten Luo und Dornfeld (2001) mit $\eta_{\Phi_{T_v}} = \eta$ unter der

	Luo/Dornfeld (2001)	Borucki, Zhao/Chang (2002)	Jeng/Huang (2005)
Form der Tuch- erhöhungen	runde Kappen mit festem Radius R_K	runde Kappen mit festem Radius R_K	runde Kappen mit festem Radius R_K
Anzahl der Tuch- erhöhungen	gleichverteilt mit Dichte η	gleichverteilt mit Dichte η	gleichverteilt mit Dichte η
Höhe der Tuch- erhöhungen	konstant	zufällig mit Dichtefunktion	zufällig mit Dichtefunktion
Verformung der Tuch- erhöhungen	elastisch (kombiniertes E-Modul)	elastisch (Interferenz ω)	elastisch (Interferenz ω_e), elastoplastisch und plastisch (Interferenz ω_p)
Angewandte Theorie	Hertz-Theorie	Greenwood-Williamson (verwendet Hertz-Th.)	Greenwood-Williamson erweitert

Tabelle 3.3: Grundlegende Ansätze aus der Fachliteratur zur Bestimmung des Kontaktflächenanteils.

Annahme, dass alle Tucherhöhungen aufgrund einer annähernd gleichen Höhe Kontakt zum Wafer haben. Der Radius R_K der Tucherhöhungen wird als konstant angenommen.

Mithilfe der Hertz-Theorie, Gleichung (5.8), ergibt sich dann für den Radius r eines Kontaktkreises:

$$r = \left(\frac{\pi q_0 R_K}{2E^*} \right)^2$$

mit

$$E^* \equiv \left(\frac{1 - \nu_W^2}{E_W} + \frac{1 - \nu_P^2}{E_P} \right)^{-1} \quad \dots \quad \begin{array}{l} R_K \quad \dots \quad \text{Krümmungsradius der Erhöhung [mm]} \\ \dots \quad \text{abgeleitetes E-Modul [N/mm}^2\text{] aus E-Modul} \\ \text{von Tuch } E_P \text{ und Wafer } E_W \text{ sowie aus der} \\ \text{Poissonzahl für Tuch } \nu_P \text{ und Wafer } \nu_W. \end{array}$$

Damit folgt:

$$A_A = 1 - \exp \left(\eta \cdot \pi \cdot \left(\frac{\pi q_0 R_K}{2E^*} \right)^2 \right).$$

Die explizite Bestimmung von η und R_K aus experimentellen Daten ist jedoch sehr schwierig, wenn nicht sogar unmöglich. Luo und Dornfeld (2001) schätzen daher anstelle der mittleren Anzahl der Tucherhöhen pro FE des Tuches lediglich die mittlere Kontaktfläche aller Tucherhöhen anhand von SEM-Aufnahmen (was der vom Autor vorgeschlagenen Vorgehensweise entspricht); anstelle von R_K wird ein verallgemeinerter Tuchparameter b bestimmt.

Die Annahme gleicher Tucherhöhen von Luo und Dornfeld (2001) ist nicht realistisch. In Zhao und Chang (2001) wird daher die Höhe der Tucherhöhen als zufällig angenommen. Gemäß Zhao und Chang (2001) ist die Verteilung der Höhe der Tucherhöhen durch eine Dichtefunktion $f_H(z)$ gegeben. Diese Funktion kann mittels konfokaler Messtechnik bestimmt werden (vgl. Kapitel 3.2.2.2). Als Kontaktflächen ergeben sich nach der hier betrachteten Theorie aus der Literatur Kreise mit *unterschiedlichen* Radien. Eine Formel für den Inhalt dieser Kontaktfläche wurde bereits von Greenwood und Williamsen (1966) ermittelt, deren Herleitung für ein besseres Verständnis hier kurz angegeben werden soll.

Bei ausgeübtem Druck q_0 stellt sich ein Kräftegleichgewicht zwischen Tuch und Wafer ein, woraus ein Abstand d_{WT} zwischen mittlerer Tuchebeine und Wafer resultiert. Wenn die Höhe Z einer Tucherhöhung größer als der Abstand d_{WT} ist, dann wird sie beim Kontakt mit dem Wafer elastisch verformt. Die maximale Verformung dieser Tucherhöhung (am ursprünglich höchsten Punkt) ist dann $\delta = Z - d_{WT}$. Gemäß der Hertz-Theorie, Gleichung (5.9) und (5.10), gilt für das Quadrat des Radius der Kontaktfläche dieser Erhöhung $r^2 = R_K(Z - d_{WT})$. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Erhöhung höher als d_{WT} ist, ist

$$P(Z > d_{WT}) = \int_{d_{WT}}^{\infty} f_H(z) \, dz.$$

Für das Boolesche Modell gilt nun:

- Aufgrund der angenommenen zufälligen Verteilung der Höhe der Tucherhöhen mit Dichtefunktion $f_H(z)$ liegt ein verdünnter Poisson-Prozess mit Intensität

$$\eta_{\Phi_{T_v}} = \eta \cdot \int_{d_{WT}}^{\infty} f_H(z) \, dz \quad \text{vor.}$$

- Das Quadrat des Radius der Kontaktfläche einer Erhöhung mit ursprünglicher Höhe Z , unter der Bedingung $Z > d_{WT}$, ist nach Hertz gleich $R_K(Z - d_{WT})$; somit

erhält man für den mittleren quadratischen Radius der Kontaktflächen

$$r^2 = \frac{\int_{d_{WT}}^{\infty} R_K(z - d_{WT}) \cdot f_H(z) dz}{\int_{d_{WT}}^{\infty} f_H(z) dz}.$$

Daher ergibt sich im Falle zufälliger Höhen der „Tuchbuckel“ folgender Kontaktflächenanteil (Greenwood und Williamson, 1966):

$$A_A = 1 - \exp \left(-\eta\pi \int_{d_{WT}}^{\infty} R_K(z - d) f_H(z) dz \right). \quad (3.9)$$

Auch hier ergibt sich bei experimenteller Verifizierung der Theorie die Schwierigkeit, η und R_K bestimmen zu müssen, was, wie bereits oben erwähnt, nur sehr schwer durchführbar ist. Die Berechnung des Parameters d_{WT} ist ebenfalls schwierig, aber über ein Kräftegleichgewicht zwischen Tuch und Wafer möglich (vgl. Zhao und Chang, 2002).

Eine weitere noch nicht betrachtete Verallgemeinerung ergibt sich durch Annahme von Tucherhöhen mit zufälligen Kappenradien. Mit dem Booleschen Modell erhält man dann für den Kontaktflächenanteil:

$$A_A = 1 - \exp \left(-\eta\pi \int_{d_{WT}}^{\infty} (z - d_{WT}) \cdot f_H(z) dz \cdot \int_0^{\infty} g_k(s) ds \right), \quad (3.10)$$

wobei $g_k(s)$ die Dichtefunktion der Kappenradien der Tucherhöhen mit einer Höhe $Z > d_{WT}$ ist. Die Funktion $g_k(s)$ ist wieder schwierig zu bestimmen.

Ein anderer Ansatz betrachtet die Tucherhöhen vereinfacht als Zylinder mit gleicher Höhe und Radius R_K (anstelle von Buckeln mit runden Kappen). Für die Berechnung des Radius des Kontaktkreises zwischen einem Tuchzylinder und dem Wafer kann dann die Elastizitätstheorie mit Querkontraktion/Hookeschem Gesetz (vgl. Schnell u. a., 2002) angewendet werden. Damit ergibt sich:

$$r = R_Z^2 \left(\frac{\nu_P}{\eta E_P} q_0 + 1 \right),$$

wobei R_Z der Radius des Zylinders, ν_P die Poissonzahl des Tuches, E_P das E-Modul des Tuches, η die Intensität der Zylinder und q_0 der Druck ist. Auch bei diesem Ansatz müssen zur Berechnung des Kontaktflächenanteils η und R_Z bekannt sein.

Aufgrund der aufgezeigten Vielfalt von Modellen zur Beschreibung des Kontaktes einer rauen mit einer glatten Oberfläche werden in der Arbeit von McCool (1986) numerische Vergleiche zur Beurteilung einiger Modelle durchgeführt. Ausgangspunkt seiner

Arbeit ist dabei das Modell von Greenwood und Williamson (1966). Dieses Modell wurde von Zhao und Chang (2002) und Borucki (2002) für den Kontakt zwischen Tuch und Wafer verwendet. Im Vergleich mit zwei verallgemeinerten und verfeinerten Modellen schlussfolgert McCool, dass das Greenwood-Williamson-Modell eine hinreichende Beschreibung für den elastischen Kontakt einer rauen mit einer glatten Oberfläche liefert. Es bleibt jedoch die Schwierigkeit, die Parameter η und R_K experimentell zu bestimmen.

zu b1.ii): Das Tuch als Ebene mit Vertiefungen („Löchern“)

Dieser Ansatz basiert auf den Erkenntnissen des Autors in Kapitel 3.2 über Poliertücher. Den Schlussfolgerungen in Kapitel 3.2.3.4 zufolge ähnelt die Tuchoberfläche eher einer Ebene mit Vertiefungen als einer Ebene mit Erhöhungen wie im vorherigen Abschnitt beschrieben. Als Modell für die Kontaktfläche ist dann die abgeschlossene Hülle des Komplementes eines Booleschen Modells geeignet. Der Anteil der wenigen Erhöhungen auf der Tuchoberfläche, die durch den Druck im Polierprozess flach gedrückt werden und somit nur geringfügig die Porosität verringern, wird hierbei, wie an anderer Stelle bereits beschrieben, vernachlässigt. Des Weiteren wird davon ausgegangen, dass die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer gegenüber dem Porenanteil gemäß der Kriterien für eine ideale Tuchoberfläche groß ist, sodass der lokale Druck näherungsweise dem von außen angewendeten Druck entspricht. Für den beim CMP verwendeten Druckbereich wird daher die Verformung des Tuches am Rande von Poren vernachlässigt.

Der Kontaktflächenanteil ergibt sich dann zu:

$$A_A = \exp(-\tau \bar{A}), \quad (3.11)$$

wobei $A_A = V_V$ der Volumenanteil des Tuchfeststoffes, τ die Intensität der Vertiefungen (= mittlere Anzahl der Vertiefungen pro FE des Tuches) und $\bar{A}$ der mittlere Flächeninhalt einer typischen Leerstelle ist. Der Volumenanteil $1 - V_V$ der Poren kann aus der im Kapitel 3.2.1.3 hergeleiteten Funktion (3.6) geschätzt werden: $1 - V_V$ entspricht dem Abknickpunkt.

zu b2): Intensität λ_P der am Abtrag beteiligten Partikel pro Flächeneinheit des Tuches

Ein wichtiger Parameter bei der Berechnung der Intensität λ_P der am Abtrag beteiligten Partikel pro Flächeneinheit des Tuches ist die Konzentration ε der Partikel im Slurry [$1/\text{mm}^3$]. Da die Partikel im Slurry zufällig verteilt sind, können sie durch einen dreidimensionalen Poisson-Prozess mit Intensität ε modelliert werden. Die Intensität λ_P

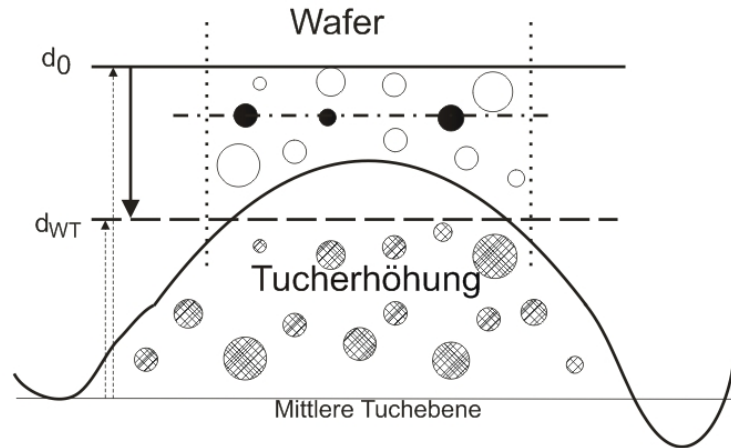


Abbildung 3.34: Zweidimensionale Abbildung zur Veranschaulichung der Theorien für das Eindringen von Partikeln ins Tuch. Der Wafer wird belastet und bewegt sich entlang des Pfeils bis zur gestrichelten Linie. Nach dem Ansatz von Zhao und Chang (2002) entspricht der Anzahl der eingedrückten Partikel die Anzahl der Partikel, die auf einer horizontalen Schnittebene durch das Slurry liegen (Strich-Punkt-Linie); in der dargestellten Skizze 3 Partikel (schwarze Kreise). Jeng und Huang (2005) nehmen an, dass zusätzlich die über der Tucherhöhung befindlichen Partikel ins Tuch eingedrückt werden. In der dargestellten Skizze sind dies zusätzlich die weißen Kreise, d. h. $3+9=12$ eingedrückte Partikel. Luo und Dornfeld (2001) nehmen an, dass die Partikel, die durch die deformierten Tucherhöhungen (mit Höhe d_{WT}) verdrängt wurden, sich in der Tuchoberfläche einlagern (15 schraffierte Kreise).

ist proportional zur Intensität aller Partikel im Slurry:

$$\lambda_P = \varepsilon \cdot k_s,$$

wobei k_s eine positive reelle Zahl ist. Der Faktor k_s wird aufgrund verschiedener Annahmen unterschiedlich berechnet (vgl. Abb. 3.34). Drei mögliche Berechnungen werden im folgenden Abschnitt zunächst erläutert, danach verglichen, um letztlich eine Vorgehensweise für die hier vorliegende Anwendung, den CMP-Prozess für Siliziumwafer, auszuwählen:

zu b2.i): Der Ansatz von Zhao und Chang (2002)

Zhao und Chang (2002) gehen davon aus, dass die sich über Tucherhöhungen befindlichen Partikel wegfließen. Es werden nur solche Partikel ins Tuch eingedrückt, die sich zum Zeitpunkt der Berührung von Tuch und Wafer direkt auf der Tuchoberfläche be-

finden. Alle ins Tuch eingedrückten Partikel bewirken Abtrag. Die Intensität der am Abtrag beteiligten Partikel pro Flächeneinheit des Tuches kann dann durch einen horizontalen ebenen Schnitt durch den dreidimensionalen Poisson-Prozess (anschaulich: durch das Volumen des Slurry) ermittelt werden. Es ergibt sich $k_s = \mathbf{E}D$, wobei $\mathbf{E}D$ den mittleren Durchmesser eines Partikels bezeichnet. Daher folgt:

$$\lambda_P = \varepsilon \cdot \mathbf{E}D.$$

zu b2.ii): Der Ansatz von Jeng und Huang (2005)

Jeng und Huang (2005) gehen beim Einsprühen des Slurry von einem Abstand d_0 zwischen mittlerer Tuchebeine und Wafer aus. Vereinfacht verwenden sie für d_0 den 3σ -Wert der Höhe der Tucherhöhungen, $d_0 = 3\sigma_{Tuch}$. Bei ausgeübtem Druck q_0 verkleinert sich der Abstand zwischen mittlerer Tuchebeine und Wafer auf den Wert $d_{WT}(q_0)$; der Wert $d_{WT}(q_0)$ wird über ein Kräftegleichgewicht an der Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer ermittelt. Nach Jeng und Huang werden alle Partikel im Raum zwischen d_0 und $d_{WT}(q_0)$ ins Tuch eingedrückt. Es ergibt sich $k_s = d_0 - d_{WT}(q_0)$ und somit

$$\lambda_P = \varepsilon \cdot (d_0 - d_{WT}(q_0)).$$

Während des Polierens bleibt die Intensität λ_P erhalten, d. h. wenn ein eingedrücktes Partikel sich wieder löst und wegfließt, wird sofort ein neues Partikel eingebettet.

zu b2.iii): Der Ansatz von Luo und Dornfeld (2001)

Luo und Dornfeld (2001) gehen davon aus, dass Wafer und Tuch an einigen Stellen zunächst direkten Kontakt haben. Beim Einsprühen des Slurry kommt es an diesen Kontaktstellen zu Stauungen. Wird der Druck des Slurry größer als der Druck an der Kontaktstelle zwischen Tuch und Wafer, diffundieren die Flüssigbestandteile des Slurry durch das Tuch hindurch bzw. hinein, während sich die Partikel auf dem Tuch einlagern. Die Intensität der Partikel im Slurry wird dabei immer bei ε gehalten. Des Weiteren bewirken bei Luo und Dornfeld (2001) nur große ins Tuch eingedrückte Partikel Abtrag, was mit einem gegenseitigen Einfluss benachbarter ins Tuch eingedrückter Partikel begründet wird.

Luo und Dornfeld (2001) gehen also bei der Modellierung nicht wie Zhao und Chang (2002) vor und betrachten die Anzahl der Partikel beim Einsprühen des Slurrys vor der Druckanwendung, sondern sie betrachten die Anzahl der Partikel bei der Druckanwendung. Die mittlere Anzahl aller Partikel zwischen mittlerer Tuchebeine und Wafer

beträgt nach Luo und Dornfelds Annahme $\varepsilon \cdot A_0 \cdot d_{WT}(q_0)$, wobei A_0 die Waferoberfläche und $d_{WT}(q_0)$ die Lücke zwischen Wafer und mittlerer Tuchebeine beim Druck q_0 ist. Die Lücke $d_{WT}(q_0)$ entspricht der mittleren Höhe der deformierten Tucherhöhen. Um die Berechnung von $d_{WT}(q_0)$ zu vereinfachen, betrachten Luo und Dornfeld (2001) das mittlere Volumen aller deformierten Tucherhöhen, das bei Polymermaterialien dem Volumen der Tucherhöhung vor der Deformation entspricht. Damit erzielen Luo und Dornfeld (2001) die Unabhängigkeit der Intensität $A_A \cdot \varepsilon \cdot d_{WT}(q_0)$ vom ausgeübten Druck q_0 .

Als nächstes betrachten Luo und Dornfeld die gegenseitige Beeinflussung benachbarter im Tuch eingedrückter Partikel: Wenn mehrere Partikel direkt nebeneinander im Tuch eingedrückt sind, beeinflussen sie sich gegenseitig in der Eindringtiefe in den Wafer. Wenn das Tuch z. B. von einem großen Partikel eingedrückt wird, liegt ein direkt daneben eingedrücktes kleines Partikel tiefer als ohne dieses Nachbarpartikelchen. Das kleine Partikel erreicht dann u. U. die Waferoberfläche nicht mehr und kann somit auch keinen Abtrag bewirken. In den vorherigen beiden Ansätzen wurde jedes Partikel unabhängig von den anderen betrachtet.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein eingedrücktes Partikel groß genug ist, um die Waferoberfläche zu erreichen, errechnen Luo und Dornfeld über die Eindringtiefen eines Partikels in den Wafer und das Tuch, wobei sie plastische Verformung von Wafer und Tuch annehmen. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel groß genug ist, um Abtrag zu bewirken, sei mit P_{max} bezeichnet (für nähere Ausführungen zur Berechnung von P_{max} siehe Luo und Dornfeld, 2001). Somit ergibt sich

$$\lambda_P = \varepsilon \cdot P_{max} \cdot d_{WT}(q_0).$$

b2.iv): Schlussfolgerung für die Intensität

Vergleichend seien drei wesentliche Punkte der Modelle herausgestellt:

- Vergleich während des Polierens:

Bei Zhao und Chang (2002) werden nur die Partikel ins Tuch eingedrückt, die sich direkt auf der Oberfläche der Tucherhöhen aufhalten. Bei Jeng und Huang (2005) hingegen werden alle solche Partikel ins Tuch eingedrückt, die sich bei Beginn des Prozessierens im Volumen über den Tucherhöhen befanden. Luo und Dornfeld (2001) betrachten direkt das Geschehen während der Politur: Eine Tucherhöhung verdrängt Partikel im Slurry. Alle diese verdrängten Partikel bewegen sich auf die Oberfläche einer Tucherhöhung und werden dort eingedrückt. Es

herrscht ein Gleichgewicht von „hinzukommenden“ und „abwandernden“ Partikeln auf einer Tucherhöhung.

- Intensitätsvergleich:

Die Intensität λ_P ist bei Zhao und Chang (2002) am kleinsten. Bei Jeng und Huang (2005) ist λ_P vom Druck abhängig: Geringer Druck ergibt kleines λ_P , hoher Druck führt zu großem λ_P . Ihre Annahmen sind jedoch nur für einen geringen Druck realistisch. Die Intensität λ_P von Luo und Dornfeld (2001) ist über einen Druckbereich von 0 bis q_d mit $d_{WT}(q_d) = 2d_0$ die größte, bei höheren Druckwerten ist λ_P von Jeng und Huang (2005) größer.

- Druckabhängigkeit der Intensität und der Eindringtiefe eines Partikels in den Wafer:

In Zhao und Chang (2002) ist sowohl die Intensität λ_P als auch die Eindringtiefe eines Partikels in den Wafer vom Druck unabhängig. In Jeng und Huang (2005) ist λ_P , jedoch nicht die Eindringtiefe vom Druck abhängig. In Luo und Dornfeld (2001) ist sowohl λ_P als auch die Eindringtiefe vom Druck abhängig.

Das Modell von Zhao und Chang (2002) ist nur eine starke Vereinfachung für den in dieser Arbeit zu beschreibenden Prozess. Da nicht nur mit sehr geringem Druck gearbeitet wird, ist das Modell von Jeng und Huang (2002) ebenfalls nicht realistisch. Daher wird für das mathematische Modell dieses Abschnittes der Ansatz von Luo und Dornfeld (2001) verwendet. Dieser Ansatz liegt dem Geschehen beim hier zu beschreibenden Abtragspolieren am nächsten.

zu c): Berechnung des Wirkungsprofils mittels der CMP-Einflussparameter

Das Querschnittsprofil der Mikrofurchen wird durch eine zufällige Funktion f_Q modelliert. Die zufällige Funktion ist von der zufälligen Tiefe W , der zufälligen Breite $2B$ und der Form der Mikrofurchen abhängig.

Da die Verursacher der Mikrofurchen kugelige Partikel sind, ist der Querschnitt der Mikrofurche ein Kreissegment, d. h. die Form ähnelt einer quadratischen Funktion. In den Ansätzen von Luo und Dornfeld (2001), Zhao und Chang (2002) sowie Jeng und Huang (2005) wird das Kreissegment vereinfacht durch ein Dreieck angenähert, was mit einem angenommenen flachen Eindringen eines solchen runden Partikels begründet wird. Im hier vorgestellten Modell wird diese Approximation nicht verwendet, sondern f_Q als

quadratische Funktion auf einer kompakten Trägermenge gewählt, da die Rechnungen ohne die Approximation nicht schwieriger sind. Im Allgemeinen kann die Form von f_Q sogar beliebig gewählt werden, solange f_Q beschränkt auf einer kompakten Trägermenge ist.

Zur Bestimmung der Tiefe W und der Breite $2B$ einer Mikrofurche wird nun ein im Tuch eingedrücktes Partikel betrachtet. Die Tiefe W entspricht der Eindringtiefe eines Partikels in den Wafer, $2B$ ist die Breite des Kontaktgebietes zwischen Partikel und Wafer. Da ein Partikel als Kugel angenommen wird, ist die Kontaktfläche zwischen Partikel und Tuch bzw. Partikel und Wafer ein Kreis.

In der Theorie der Kontaktmechanik existieren unterschiedliche Herangehensweisen zur Bestimmung von W und B , abhängig von der vorausgesetzten Verformungsart bei Kontakt, von denen zwei zunächst möglich erscheinende hier diskutiert werden.

zu c1): Zwei Ansätze

In Tabelle 3.4 werden zwei Ansätze aus der Literatur mit verschiedenen angenommenen Verformungsarten vergleichend dargestellt (siehe auch Abb. 3.35 und 3.36).

Annahme	Luo/Dornfeld (2001)	Zhao/Chang (2002), Jeng/Huang (2005)
Verformung des Wafers	plastisch („sliding indentation“)	plastisch
Verformung des Tuches	plastisch („quasi-static indentation“)	elastisch
Zwischenraum zwischen Tucherhöhung und Wafer	vorhanden	nicht vorhanden
Angewandte Theorie	Kontaktmechanik	Kontaktmechanik und Kräftegleichgewicht

Tabelle 3.4: Bestimmung der Tiefe W und der Breite $2B$ einer Mikrofurche: Vergleich des Ansatzes von Luo und Dornfeld (2001) mit dem von Zhao und Chang (2002) bezüglich der angenommenen Verformungsarten.

Mit beiden Ansätzen werden Formeln für die Eindringtiefe W und die halbe Kontaktbreite B hergeleitet (vgl. Luo und Dornfeld, 2001 sowie Zhao und Chang, 2002). In Tabelle 3.5 werden lediglich die Formeln sowie Gemeinsamkeiten und Unterschiede in

den unabhängigen Variablen tabellarisch angegeben.

Luo/Dornfeld (2001)	Zhao/Chang (2002), Jeng/Huang (2005)
$W = \frac{1}{2b_1} (E_{(WP)}^{2/3} q_0^{1/3}) \frac{\mathbf{E}D_A}{H_W}$	$W^3 + \left(\frac{9\pi^2 H_W^2}{8E_{SP}^2} - 3 \right) \mathbf{E}DW^2 + 3\mathbf{E}D^2W - \mathbf{E}D^3 = 0$
W abhängig von: Härte H_W des Wafers E-Modul $E_{(WP)}$ für Wafer-Tuch-Kombination Tuchparameter b_1 (mit Radius und Dichte der Tucherhöhungen) Druck q_0 mittlerer Durchmesser $\mathbf{E}D_A$ der am Abtrag beteiligten Partikel	W abhängig von: Härte H_W des Wafers E-Modul E_{SP} für Partikel-Tuch-Kombination keine weiteren Tuchparameter unabhängig vom Druck mittlerer Durchmesser $\mathbf{E}D$ aller Partikel
$B = \sqrt{W\mathbf{E}D_A}$ hergeleitet über Pythagoras	$B = \sqrt{W\mathbf{E}D}$ hergeleitet über Pythagoras
Kraft F_{SW} zwischen Partikel und Wafer: $F_{SW} = \frac{1}{2}H_W\pi B^2$	Kraft F_{SW} zwischen Partikel und Wafer: $F_{SW} = H_W\pi\mathbf{E}DW = H_W\pi B^2$

Tabelle 3.5: Bestimmung der Tiefe W und der Breite $2B$ einer Mikrofurche: Vergleich der Formeln und unabhängigen Variablen von Luo und Dornfeld (2001) und Zhao und Chang (2002).

Drei wesentliche Unterschiede werden noch einmal erläutert, um die Entscheidung für einen dieser Ansätze für das stochastische Modell nachvollziehbar zu machen:

- Da in Luo und Dornfeld (2001) nicht alle im Tuch eingedrückten Partikel Abtrag bewirken (siehe vorheriger Abschnitt), betrachten sie bei der Berechnung der Abtragsrate nur den mittleren Partikeldurchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel. Zhao und Chang (2002) hingegen verwenden den mittleren Durchmesser aller Partikel.
- Bei Zhao und Chang (2002) ist die Eindringtiefe W eines Partikels in den Wafer unabhängig vom Druck. Sie betonen das Kräftegleichgewicht, das sich in Abhängigkeit von den Materialeigenschaften (H_W, E_{SP}) beim Eindringen eines Partikels einstellt. Ihr Modell gilt allerdings nur für einen geringen Druck (leichter Anpressdruck, geeignet für leichte Oberflächenbearbeitung und nur kleine Eindringtiefen

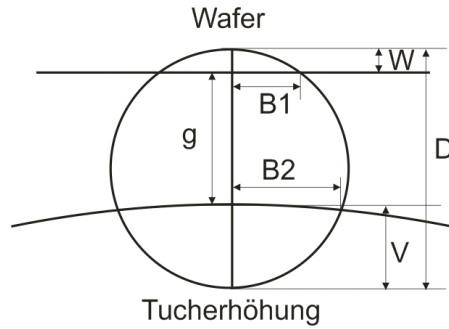


Abbildung 3.35: Partikel-Wafer-Kontakt: Luo und Dornfeld (2001) gehen von plastischer Verformung zwischen Partikel und Wafer bzw. Partikel und Tuch aus. Es existiert ein Zwischenraum g zwischen Tuch und Wafer. Die Kontaktradien B_1 zwischen Partikel und Wafer bzw. B_2 zwischen Partikel und Tuch sind verschieden. Es gilt: Zwischenraum plus Eindringtiefe des Partikels in den Wafer plus Eindringtiefe des Partikels ins Tuch ist gleich Durchmesser des Partikels: $g + V + W = D$.

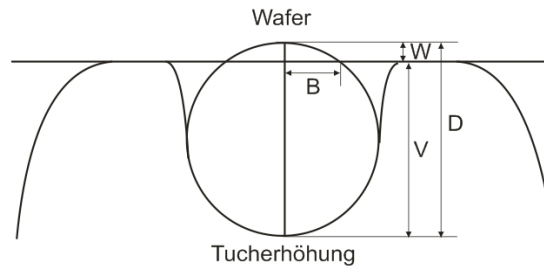


Abbildung 3.36: Wafer-Partikel-Tuch-Kontakt: Zhao und Chang (2002) nehmen plastische Verformung beim Kontakt des Partikels und des Wafers an. Der Kontakt zwischen Partikel und Tuch ist durch elastische Verformung gekennzeichnet. Das Partikel ist weit ins Tuch eingedrückt. Es gilt: Eindringtiefe des Partikels in den Wafer plus Eindringtiefe des Partikels ins Tuch ist gleich Durchmesser des Partikels: $W + V = D$.

des Partikels in den Wafer). Sie vernachlässigen, dass sich die Elastizitätseigenschaft, d. h. das E-Modul E_{SP} , für die Partikel-Tuch-Kombination mit zunehmendem Druck verändert (verkleinert). Die Annahme eines Prozessierens mit leichtem Anpressdruck ist hier ungeeignet, da für den hier zu beschreibenden Abtragspolierprozess aus Produktivitätsgründen vergleichsweise hoher Druck verwendet wird. In Luo und Dornfeld (2001) ergibt sich die Abhängigkeit der Eindringtiefe W vom Druck und von den Tucheinenschaften durch die Betrachtung der mittleren auf ein Partikel wirkenden Kraft, die wiederum aus dem Wafer-Tuch-Kontakt abgeleitet

ist.

- Die Eindringtiefe ist bei Luo und Dornfeld (2001) größer als bei Zhao und Chang (2002), da die Kraftwirkung an der Kontaktstelle zwischen Wafer und Partikel größer ist. Zur Beleuchtung der Kräfte an der Kontaktstelle zwischen Partikel und Wafer erfolgt eine Beschränkung auf den $\mathbb{R}^2$. Zhao und Chang (2002) betrachten die komplette Kontaktfläche, d. h. einen Vollkreis, als Fläche für die Kraftwirkung. Luo und Dornfeld (2001) dagegen nehmen gleitenden Einschnitt („sliding indentation“) als plastische Verformung an. Gleitender Einschnitt heißt hier, dass das Partikel fest ins Tuch gedrückt ist; durch die Bewegung des Tuches wird das Partikel über die Waferoberfläche „geschliffen“; das Partikel „schneidet“ eine Mikrofurche. Beim gleitenden Einschnitt wirkt die Kraft allerdings nur auf die vordere Hälfte des Kontaktkreises: Da sich die hintere Hälfte des Kontaktkreises in der soeben „geschnittenen Mikrofurche“ bewegt, kann von ihm keine Kraft mehr auf den Wafer ausgeübt werden und somit auch kein Materialabtrag bewirkt werden (siehe Abb. 3.37).

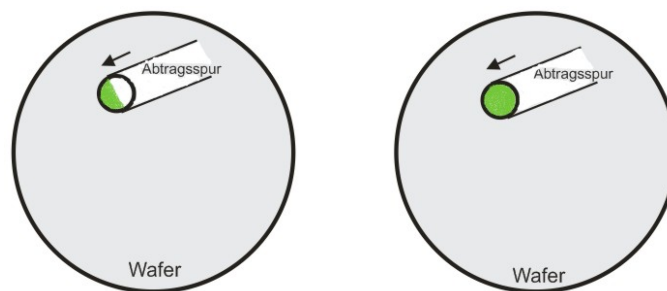


Abbildung 3.37: Zur Beleuchtung der Kräfte an der Kontaktstelle zwischen Partikel und Wafer erfolgt eine Beschränkung auf den $\mathbb{R}^2$ (Draufsicht). Links: Luo und Dornfeld (2001) nehmen gleitenden Einschnitt („sliding indentation“) als plastische Verformung an. Beim gleitenden Einschnitt wirkt die Kraft nur auf die vordere Hälfte des Kontaktkreises (grün), da beim hinteren Halbkreis das Material bereits abgetragen wurde. Rechts: In Zhao und Chang (2002) wird dagegen angenommen, dass die Kraft auf den kompletten Kontaktkreis wirkt.

zu c2): Schlussfolgerung für das Wirkungsprofil

Im Folgenden wird der Ansatz von Luo und Dornfeld (2001) verwendet, da das Modell von Zhao und Chang (2002) nur für leichten Anpressdruck gilt. Da hier Abtragspolitur mit vergleichsweise hohem Druck beschrieben werden soll, ist das Modell von Zhao und

Chang (2002) ungeeignet. Es hat dennoch seine Berechtigung für andere Prozesse, in denen der Abtrag keine Rolle spielt.

Nach Luo und Dornfeld (2001) ergibt sich die Eindringtiefe wie folgt:

$$W = \frac{2F_{SW}}{\pi(\mathbf{E}D_A)H_W},$$

wobei $\mathbf{E}D_A$ der mittlere Durchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel, H_W die Härte des Wafers und F_{SW} die mittlere auf ein Partikel wirkende Kraft ist. Diese Kraft ergibt sich wiederum aus $F_{SW} = 0,25\pi(\mathbf{E}D_A)^2q$, wobei $q = q_0/A_A$ der lokal wirkende Druck an einer Kontaktstelle zwischen Tuch und Wafer ist (vgl. Luo und Dornfeld, 2001). Für den Kontaktflächenanteil A_A wird in dieser Arbeit nicht wie in Luo und Dornfeld (2001) das Greenwood-Williamson-Modell verwendet, sondern Formel (3.11).

Die halbe Breite B des Kontaktgebietes ergibt sich aus

$$B = \sqrt{W \cdot \mathbf{E}D_A}.$$

Wie bereits erwähnt wird für das Querschnittsprofil f_Q einer Mikrofurche eine quadratische Funktion gewählt, d. h.

$$f_Q(p) = \begin{cases} W \cdot \left(1 - \frac{p^2}{B^2}\right) \\ 0 \end{cases} = \begin{cases} W \cdot \left(1 - \frac{p^2}{W \cdot \mathbf{E}D_A}\right), & -B < p < B, \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}, \text{ d. h.}$$

$$f_Q(p) = \frac{\mathbf{E}D_A}{2H_W} \cdot \frac{q_0}{A_A} \cdot \left(1 - \frac{p^2}{\frac{(\mathbf{E}D_A)^2}{2H_W} \cdot \frac{q_0}{A_A}}\right), \quad (3.12)$$

wobei $-p$ den Abstand eines beliebigen Punktes zur Mittellinie der Furche, d. h. zu einer Geraden des Geradenprozesses, bezeichnet.

zu d): Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche

Nachdem die abstrakten mathematischen Modellparameter auf physikalische Parameter überführt wurden, können aus den Formeln des mathematischen Modells aus Kapitel 2.2.2 Beziehungen zwischen den physikalischen Einflussparametern und kennzeichnenden Größen des Zufallsfeldes, d. h. des Abtragsprozesses, herausgestellt werden.

Die Ebenheit der polierten Waferoberfläche kann mittels der Varianz der Oberflächentiefe charakterisiert werden. Im Folgenden wird zunächst die Formel für die Varianz des

Geraden-Shot-Noise-Feldes aus Kapitel 2.2.2 auf den hier vorliegenden Spezialfall übertragen, um danach Beziehungen zwischen den physikalischen Einflussparametern und der Varianz der Abtragstiefe abzuleiten.

Mit Formel (3.7) für die Liniendichte L_A und Formel (3.12) für das Wirkungsprofil ergibt sich mit Formel (2.44) aus Kapitel 2.3.1.4, Beispiel 2.3.2, für die Varianz der Abtragstiefe:

$$\mathbf{var}[Z_t] = \frac{16}{15} A_A \cdot \lambda_P \cdot v \cdot t \cdot W^2 \cdot B = \frac{16}{15} \cdot \lambda_P \cdot v \cdot t \cdot \left(\frac{q_0}{2H_W} \right)^{\frac{5}{2}} \cdot (\mathbf{E}D_A)^3 \cdot \frac{1}{\sqrt{A_A^3}},$$

wobei

A_A	...	Kontaktflächenanteil
λ_P	...	Intensität der am Abtrag beteiligten Partikel
v	...	Relativgeschwindigkeit
t	...	Zeit
q_0	...	ausgeübter Druck
H_W	...	Härte des Wafers
$\mathbf{E}D_A$	...	mittlerer Durchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel bezeichnet.

Wird der vorhandene, aber geringe Einfluss der Prozessparameter auf die Intensität der am Abtrag beteiligten Partikel vernachlässigt, gibt es folgende Abhängigkeiten zwischen:

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem Druck:

$$\mathbf{var}[Z_t] \sim q_0^{\frac{5}{2}},$$

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem mittleren Durchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel:

$$\mathbf{var}[Z_t] \sim \mathbf{E}D_A^3 \quad \text{und}$$

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem Kontaktflächenanteil:

$$\mathbf{var}[Z_t] \sim \frac{1}{\sqrt{A_A^3}}$$

mit $A_A = V_V$, V_V Feststoffanteil der TUCHoberfläche.

Der mittlere Durchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel wird in Luo und Dornfeld (2001) durch $\mathbf{E}D_A = \mathbf{E}D + 3\sqrt{\mathbf{var}D}$, D Durchmesser eines Partikels, approximiert, da nach Luo und Dornfeld (2001) nur die großen Partikel Abtrag bewirken können.

Analog können mithilfe der in Kapitel 2.2.2 hergeleiteten Formeln die mittlere Abtragsrate sowie die Korrelation des Abtrags an zwei verschiedenen Punkten auf dem Wafer untersucht werden.

3.3.1.3 Beschreibung des Abtragsprozesses mittels eines Geraden-Maximum-Feldes

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie der Abtragsprozess mit einem Poissonschen Geraden-Maximum-Zufallsfeld (vgl. Kapitel 2.3.2) beschrieben werden kann. Dieses Modell wird hier erstmals auf den Abtragsprozess beim CMP angewendet. Das Poissonsche Geraden-Maximum-Zufallsfeld ist analog zum Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld durch zwei Parameter gegeben: die Liniendichte des Poisson-Geradenprozesses und das Wirkungsprofil. Diese beiden Modellparameter werden analog zum Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld erstmals mithilfe der Arbeiten von Luo und Dornfeld (2001), Zhao und Chang (2002), Jeng und Huang (2005) auf physikalische CMP-Einflussparameter überführt. Es wird die eindimensionale Verteilungsfunktion für die Abtragstiefe angegeben, aus der leicht Kenngrößen wie die Varianz der Abtragstiefe für konkrete Anwendungsfälle berechnet werden können.

Für die Beschreibung wird wie folgt vorgegangen:

- a) Definition und physikalische Grundlage des Modells
- b) Berechnung der Modellparameter mittels der CMP-Einflussparameter
- c) Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche.

zu a): Definition und physikalische Grundlage des Modells

Da das Modell des Geraden-Maximum-Feldes überwiegend auf denselben Ansätzen wie das Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld basiert, sei hier lediglich die Grundidee und der Unterschied zwischen dem Geraden-Maximum-Feld und dem Geraden-Shot-Noise-Feld ge-

nannt, für weitere Erläuterungen sei auf den Abschnitt „a) Definition und physikalische Grundlage des Modells“ in Kapitel 3.3.1.2 verwiesen.

Ausgangspunkt der Modellierung ist die Annahme, dass die in der Turoberfläche eingedrückten Slurry-Partikel aufgrund des Druckes und der Relativbewegung „Mikrofurchen“ auf der Waferoberfläche erzeugen und somit mechanisch Material abtragen (Abb. 3.31). Bei Überlagerung von Mikrofurchen, z. B. an Kreuzungspunkten, addieren sich nun aber nicht wie beim Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld die Abtragstiefen, sondern es wird das Maximum der Abtragstiefen gebildet. Dies entspricht der Vorstellung, dass ein Partikel an einem Kreuzungspunkt nur dann die vorhandene Spur vertieft, wenn es größer als das vorherige Partikel ist. Es „rutscht“ quasi bei einem Kreuzungspunkt mit einer anderen Mikrofurche nicht in die Vertiefung hinein, sondern „gleitet“ unbeeinflusst darüber hinweg.

Die Abtragstiefe ist analog zum Geraden-Shot-Noise-Feld von der Anzahl und der Form der Mikrofurchen abhängig, wobei die Zentren der Mikrofurchen durch einen stationären und isotropen Poisson-Geraden-Prozess und das Querschnittsprofil der Mikrofurchen durch eine Funktion f_Q beschrieben werden (vgl. Kapitel 3.3.1.2).

Die polierte Waferoberfläche kann dann nach den obigen Ausführungen als ein (Teil eines) Poissonsches(n) Geraden-Maximum-Feld(es) $\{Z_t(\mathbf{x})\}$ modelliert werden, wobei $\mathbf{x}$ einen Punkt auf der Waferoberfläche bezeichnet. $Z_t(\mathbf{x})$ ist die erreichte Oberflächentiefe des Wafers am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t mit

$$Z_t(\mathbf{x}) = \sup_{l_i \in \Psi_P} f_Q(d_1(\mathbf{x}, l_i)), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

wobei $\Psi_P = \{l_i\}$ ein Poisson-Geradenprozess mit Liniendichte L_A und $f_Q : \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ eine beliebige oberhalbstetige und fast sicher positive Funktion mit kompakter Trägermenge und d_1 eine Funktion ist, die den Abstand des Punktes $\mathbf{x}$ zur Geraden l_i angibt (vgl. Kapitel 2.3.2.1).

Das Koordinatensystem ist analog zum Geraden-Shot-Noise-Zufallsfeld (vgl. 3.3.1.2) gewählt. Es wird ebenfalls wie in 3.3.1.2 ein homogenes Zufallsfeld angenommen, sodass die eindimensionale Verteilungsfunktion des Zufallsfeldes unabhängig vom Punkt $\mathbf{x}$ ist (vereinfachte Notation: $Z_t = Z_t(\mathbf{x})$).

zu b): Berechnung der Modellparameter mittels der CMP-Einflussparameter

Um nun physikalische Informationen über den Abtrag bzw. die polierte Waferoberfläche mithilfe der Formeln des Poissonschen Geraden-Maximum-Feldes zu erhalten, ist es notwendig, die kennzeichnenden Parameter des Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes, die Liniendichte L_A und die Funktion f_Q auf CMP-Einflussparameter zu überführen. Dies wurde bereits ausführlich in Kapitel 3.3.1.2 für das Geraden-Shot-Noise-Feld diskutiert. Aus den dortigen Betrachtungen ergibt sich

$$L_A = A_A \cdot \lambda_P \cdot v \cdot t, \quad (3.13)$$

wobei A_A den Kontaktflächenanteil, λ_P die Intensität der am Abtrag beteiligten Partikel, v die Relativgeschwindigkeit und t die Zeit bezeichnet. Weiterhin ist gemäß der Ausführungen in 3.3.1.2 das Wirkungsprofil

$$f_Q(p) = W \cdot \left(1 - \frac{p^2}{B^2}\right), \quad (3.14)$$

wobei

$$W = \frac{\mathbf{E}D_A \cdot q_0}{2H_W \cdot A_A} \quad \text{die Tiefe einer Mikrofurche und}$$

$$B = \mathbf{E}D_A \cdot \sqrt{\frac{q_0}{2H_W \cdot A_A}} \quad \text{die halbe Breite einer Mikrofurche ist.}$$

Dabei bezeichnet $\mathbf{E}D_A$ den mittleren Durchmesser eines am Abtrag beteiligten Partikel, q_0 den ausgeübten Druck, H_W die Härte des Wafers. Es sei angemerkt, dass der mittlere Durchmesser der am Abtrag beteiligten Partikel in Luo und Dornfeld (2001) durch $\mathbf{E}D_A = \mathbf{E}D + 3\sqrt{\mathbf{var}D}$, D Durchmesser eines Partikels, approximiert wird, da nach Luo und Dornfeld (2001) nur die großen Partikel Abtrag bewirken können.

zu c): Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche

Hier wird nun die Formel für die eindimensionale Verteilungsfunktion des Geraden-Maximum-Feldes aus Kapitel 2.3.2 für den hier vorliegenden Spezialfall angegeben. Aus der Verteilungsfunktion lassen sich leicht weitere Kenngrößen für konkrete Werte der Prozessparameter berechnen.

Mit Formel (3.13) für die Liniendichte L_A und Formel (3.14) für das Wirkungsprofil ergibt sich aus Kapitel 2.3.2.2, Formel (2.48) bzw. Beispiel 2.3.3 folgende eindimensionale

Verteilungsfunktion:

$$F_M(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \exp\left(-2L_A B \sqrt{\frac{W-z}{W}}\right), & 0 \leq z \leq W, \\ 1, & z > W. \end{cases} = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ \exp\left(-2\lambda_P v t \mathbf{E} D_A \sqrt{\frac{q_0}{2H_W}} \sqrt{A_A} \sqrt{1 - \frac{2zH_W A_A}{\mathbf{E} D_A q_0}}\right), & 0 \leq z \leq W, \\ 1, & z > W. \end{cases}$$

3.3.1.4 Beschreibung des Abtrags mittels eines Additiven Booleschen Modells

In diesem Abschnitt wird erläutert, wie der Abtragsprozess mit einem Additiven Booleschen Modell, d. h. mit einer Kombination aus Booleschem Modell und Shot-Noise-Prozess (vgl. Kapitel 2.4.2) beschrieben werden kann. Dieser Ansatz wurde erstmalig im Rahmen dieser Arbeit entwickelt. Es wird dabei völlig konträr zur bisher herrschenden Meinung in der Fachliteratur an die Modellierung des Abtragsprozesses herangegangen.

Das Additive Boolesche Modell ist durch drei Parameter gegeben: die Intensität des Poisson-Punktprozesses, das typische Korn und der Gewichtungsfaktor. Diese Modellparameter werden mithilfe der Betrachtungen in Kapitel 3.2.3.4 sowie der Arbeit von Borucki (2002) auf physikalische CMP-Einflussparameter überführt. Der Schwerpunkt des Modells liegt in dieser Arbeit auf der Beschreibung der Varianz der Abtragstiefe, d. h. der Unebenheit der polierten Waferoberfläche sowie dem Herausarbeiten des Zusammenhangs zwischen dieser Varianz und der Beschaffenheit der Poliertuchoberfläche. Das Modell bietet darüber hinaus die Möglichkeit, durch Verfeinerung weitere Zusammenhänge im Polierprozess zu erschließen. Hier eröffnen sich für zukünftige Forschungen erhebliche neue Ansätze.

Für die Beschreibung wird wie folgt vorgegangen:

- a) Definition und physikalische Grundlage des Modells
- b) Berechnung der Modellparameter mittels der CMP-Einflussparameter
- c) Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche

zu a): Definition und physikalische Grundlage des Modells

Das Modell basiert auf dem Ansatz, dass der Abtrag durch ein flächiges Ablösen ganzer Siliziumschichten entsteht. Durch chemische Prozesse wird die Waferoberfläche zunächst

angelöst. Durch die Tuchoberfläche werden dann die noch notwendigen Kräfte realisiert, um die Schicht endgültig abzulösen. Das Tuch dient als „Vollender“ des Ablösevorganges und somit des Abtrags. Einzelne am Abtrag beteiligte Partikel werden bei dieser Herangehensweise nicht betrachtet.

Es wird also angenommen, dass nur an den Stellen auf dem Wafer Abtrag entsteht, wo sich Tuchfeststoff und Wafer berühren. Umgekehrt entsteht an den Stellen kein Abtrag, wo der Wafer auf eine Pore im Tuch trifft. Der rein chemische Abtrag an diesen Stellen ist vernachlässigbar gering. Die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer wird analog Kapitel 3.2.3.4 als Komplement eines Booleschen Modells modelliert, die Menge der Poren bildet dann gerade das Boolesche Modell. Die Abtragstiefe, die an einer Stelle auf dem Wafer bei einem Kontakt mit dem Tuch entsteht, ist von weiteren Einflussfaktoren abhängig und sei hier zunächst vereinfacht als Gewichtungsfaktor k eingeführt. Auf die Überführung des Faktors k in weitere physikalische Parameter wird im nächsten Abschnitt eingegangen. Wird eine Stelle auf dem Wafer nacheinander von zwei Tuchstellen berührt, so addieren sich die entsprechenden Abtragstiefen, sofern die chemische Komponente zwischen den Tuchberührungen wieder wirken konnte.

Die polierte Waferoberfläche kann also nach den obigen Ausführungen als ein (Teil eines) Additives(n) Boolesches(n) Modell(s) $\{Z_t^H(\mathbf{x})\}$ modelliert werden, wobei $\mathbf{x}$ einen Punkt auf der Waferoberfläche bezeichnet. $Z_t^H(\mathbf{x})$ ist die Höhe des nicht abgetragenen Materials am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t mit

$$Z_t^H(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{x}_i \in \Phi} k \cdot \mathbf{1}_{(\Xi_i + \mathbf{x}_i)}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2,$$

wobei $\Phi = \{\mathbf{x}_i\}$ die Menge der Porenzentren, k der oben eingeführte Gewichtungsfaktor und die $\{\Xi_i\}$ die Menge der Poren sind. Die Funktion $\mathbf{1}_{(\Xi_i + \mathbf{x}_i)}(\mathbf{x})$ heißt Indikatorfunktion und ist wie folgt definiert:

$$\mathbf{1}_{(\Xi_i + \mathbf{x}_i)}(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \Xi_i + \mathbf{x}_i \\ 0 & \mathbf{x} \notin \Xi_i + \mathbf{x}_i. \end{cases}$$

Die Menge Φ ist ein stationärer und isotroper Poisson-Punktprozess mit Intensität λ_Z und $\{\Xi_1, \Xi_2, \dots\}$ eine Sequenz von unabhängigen, zufälligen kompakten Mengen des $\mathbb{R}^2$, die unabhängig vom Poisson-Prozess Φ sind (vgl. Kapitel 2.4.2). Es sei angemerkt, dass hier $Z_t^H(\mathbf{x})$ die Höhe des nicht abgetragenen Materials in $\mathbf{x}$ bezeichnet, während in den vorherigen beiden Modellen $Z_t(\mathbf{x})$ immer für die Tiefe des abgetragenen Materials stand. Die Varianz der Höhe des nicht abgetragenen Materials ist jedoch gleich der Varianz der Tiefe des abgetragenen Materials.

Das Koordinatensystem ist so gewählt, dass der Anfangswert der Waferoberflächenhöhe $Z_0^H(\mathbf{x}) \equiv 0$ ist. Da beim Zeitpunkt $t = 0$ von einem glatten Wafer ausgegangen wird und der Polierprozess Höhen von nicht abgetragenen Material erzeugt, ist $\{Z_t^H(\mathbf{x})\}$ nichtnegativ. Da ein homogenes Zufallsfeld angenommen wird, ist die eindimensionale Verteilungsfunktion des Zufallsfeldes

$$F_t^H(z) = P(Z_t^H(\mathbf{x}) \leq z)$$

unabhängig vom Punkt $\mathbf{x}$. In den folgenden Betrachtungen wird $\mathbf{x}$ fixiert und die Notation vereinfacht: $Z_t^H = Z_t^H(\mathbf{x})$.

Um nun physikalische Informationen über die Varianz des Abtrags mithilfe der Formeln des Additiven Booleschen Modells aus Kapitel 2.4.2 zu erhalten, werden im Folgenden die kennzeichnenden Parameter des Additiven Booleschen Modells, die Intensität λ_Z des Poisson-Punktprozesses, die Mengen $\{\Xi_i\}$ und der Gewichtungsfaktor k auf CMP-Einflussparameter überführt.

zu b): Berechnung der Modellparameter mittels der CMP-Einflussparameter

Die Intensität λ_Z und die Mengen $\{\Xi_i\}$ sind direkt mit der Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer und somit mit der Tuchoberfläche verbunden. Gemäß Kapitel 3.2.3.4 entsprechen die Mengen $\{\Xi_i + \mathbf{x}_i\}$ den Poren in der Tuchoberfläche; ihre Vereinigung kann mit einem Booleschen Modell beschrieben werden. Die Intensität λ_Z ist proportional zur mittleren Anzahl τ von Poren pro Flächeneinheit des Tuches. Der Proportionalitätsfaktor, der mit t bezeichnet wird, ist ein die Zeit beschreibender Parameter: t entspricht der Anzahl der Rotationen des Tuches; t kann über die gegebene Rotationsgeschwindigkeit und die Zeit ermittelt werden.

Anstelle der Menge der Poren $\{\Xi_i\}$ wird häufig auch nur der endliche mittlere Flächeninhalt einer typischen Pore (d. h. einer kompakten zufälligen Referenzmenge Ξ_0) benötigt. Eine ausreichende Approximation der Menge Ξ_0 ist eine Kreisfläche (vgl. z. B. Abb. 3.22 sowie Abb. 3.24). Mittels Bildanalyse können τ und der mittlere Flächeninhalt einer Pore Ξ_0 anhand von Mikroskopaufnahmen geschätzt werden.

Der Gewichtungsfaktor k wird hier als ein konstanter Parameter angenommen, der die Einflüsse von Relativgeschwindigkeit, Slurry, Druck, Temperatur u. a. enthält. Gemäß Borucki (2002) kann k wie folgt zerlegt werden: $k = c \cdot q$ mit c als konstanten Parameter, der proportional zur Relativgeschwindigkeit ist sowie andere Einflussparameter enthält,

und q als lokaler, an der Kontaktstelle zwischen Tuch und Wafer wirkender Druck. Dieser lokale Druck q ist größer als q_0 und ergibt sich aus $q = q_0/A_A$ (Borucki, 2002), woraus

$$k = \frac{c \cdot q_0}{A_A}$$

folgt. Zur Berechnung des Kontaktflächenanteils A_A wird die Formel (2.3) des Booleschen Modells verwendet: $A_A = \exp(-\tau \bar{A})$ mit τ Intensität der Poren und $\bar{A}$ mittlere Fläche der typischen Pore.

Es sei angemerkt, dass hier vereinfachend wie in Preston (1927) und Borucki (2002) von einer linearen Abhängigkeit zwischen Druck und Abtrag ausgegangen wird. Führt diese vereinfachende Annahme nachweislich zu groben Fehlern im Modell, kann die lineare Funktion durch eine allgemeinere Funktion f_a ersetzt werden: $k = c \cdot f_a(q)$ (z. B. $k = c \cdot \exp(q)$). Die Grundgedanken der folgenden Ausführungen bleiben dabei erhalten.

zu c): Beziehungen zwischen den Einflussparametern und der Ebenheit der polierten Waferoberfläche

Die Ebenheit der polierten Waferoberfläche kann mittels der Varianz der Oberflächenhöhe charakterisiert werden. Im Folgenden wird zunächst die Formel für die Varianz des Additiven Booleschen Modells aus Kapitel 2.4.2 auf den hier vorliegenden Spezialfall übertragen, um danach Beziehungen zwischen den physikalischen Einflussparametern und der Varianz der Oberflächenhöhe abzuleiten.

Mit Formel (2.53) ergibt sich

$$\text{var}[Z_t^H(\mathbf{x})] = \left(\frac{c \cdot q_0}{\exp(-\tau \bar{A})} \right)^2 \cdot \tau \cdot t \cdot \bar{A}, \quad \text{wobei} \quad (3.15)$$

- c ... konstanter Parameter, der proportional zur Relativgeschwindigkeit ist sowie andere Einflussparameter enthält
- q_0 ... ausgeübter Druck
- τ ... Intensität der Poren (= mittlere Anzahl der Poren pro FE Tuchoberfläche)
- t ... Anzahl der Tuchrotationen
- $\bar{A}$... mittlere Fläche der typischen Pore.

Daraus ergeben sich folgende Abhängigkeiten zwischen:

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem Druck:

$$\text{var}[Z_t^H] \sim q_0^2,$$

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem andere Einflüsse enthaltenden Faktor c :

$$\mathbf{var}[Z_t^H] \sim c^2 \quad \text{und}$$

- der Unebenheit der polierten Waferoberfläche und dem Kontaktflächenanteil:

$$\mathbf{var}[Z_t^H] \sim \tau \cdot \bar{A} \cdot \exp(2\tau \bar{A}).$$

Analog können mithilfe der in Kapitel 2.3.2 hergeleiteten Formeln weitere Kenngrößen untersucht werden.

3.3.1.5 Vergleich der Modelle

Nach der Vorstellung von drei theoretisch möglichen stochastischen Modellen für den Abtragsprozess beim CMP werden in diesem Kapitel Gemeinsamkeiten und Unterschiede in Tabelle 3.6 zusammengefasst.

Stochastisches Modell	Geraden-Shot-Noise-Feld	Geraden-Maximum-Feld	Additives Boolesches Modell
Entstehung des Abtrags durch	Mikrofurchen verursacht durch Partikel	Mikrofurchen verursacht durch Partikel	flächiges Ablösen ganzer Siliziumschichten
Verhalten bei Überlagerung zweier Abtragsgebiete	Addition	Maximierung	Addition
Kontaktflächenmodell	Komplement eines Booleschen Modells	Komplement eines Booleschen Modells	Komplement eines Booleschen Modells
Korrelation Unebenheit des Wafers und Kontaktflächenanteil	$\mathbf{var}Z_t \sim \frac{1}{\sqrt{[\exp(-\tau \bar{A})]^3}}$	nicht explizit angebbbar	$\mathbf{var}Z_t^H \sim \frac{\tau \bar{A}}{\exp(-2\tau \bar{A})}$

Tabelle 3.6: Vergleich von drei theoretisch möglichen stochastischen Modellen für den Abtragsprozess beim CMP.

Experimente werden nun zeigen, welches der Modelle tatsächlich in der Lage ist, die chemisch-mechanische Politur von Siliziumwafern zu beschreiben.

3.3.2 Experimentelle Verifizierung der stochastischen Modelle

Anhand von Experimenten soll nachgewiesen werden, welches der oben genannten Modelle den CMP-Prozess von Siliziumwafern tatsächlich beschreibt, um hieraus konkrete Ansätze für Optimierungen abzuleiten. Es werden zunächst die Partikel im Slurry mikroskopisch untersucht, die angeblich die Mikrofurchen erzeugen sollen. Danach werden kurz einige ausgewählte Messverfahren dargestellt, mit denen die Ebenheit der Waferoberfläche charakterisierbar ist. Diese Messverfahren werden dann bei den durchgeführten Experimenten zur Beurteilung der Waferoberfläche herangezogen. Die Beschreibung der untersuchten Proben und ihrer Ergebnisse bildet den Hauptteil dieses Kapitels.

3.3.2.1 Slurry-Partikel

An dieser Stelle werden die Partikel im Slurry bezüglich Form und Größe anhand von Transmissions-Elektronen-Mikroskopie (kurz TEM, vgl. Reimer, 1989) und Scheibenzentrifugierung (vgl. Laidlaw und Steinmetz, 2005) beurteilt.

Beim vorliegenden CMP-Prozess sind die abtragenden Partikel SiO_2 -Partikel (Kieselzol). In Abbildung 3.38 ist eine Aufnahme des Kieselzols mittels TEM zu sehen.

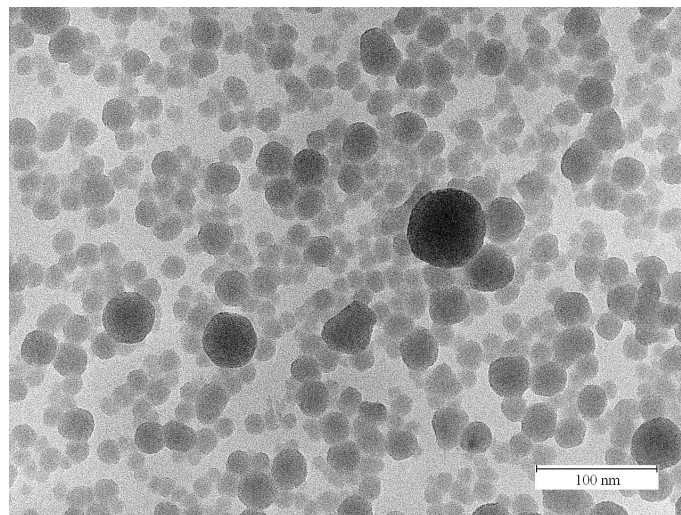


Abbildung 3.38: Partikel im Slurry (Transmissions-Elektronen-Mikroskopie).

In Abbildung 3.38 ist deutlich zu erkennen, dass die Partikel annähernd kugelförmig

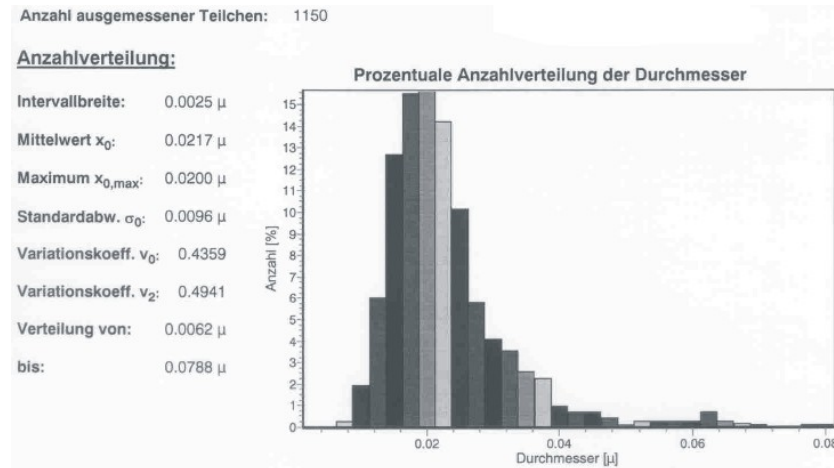


Abbildung 3.39: Verteilung der Durchmesser der Slurry-Partikel (Transmissions-Elektronen-Mikroskopie).

mit unterschiedlichem Durchmesser sind. Anhand der TEM-Aufnahme in Abb. 3.38 wurde mittels Bildanalyse die Größe der Durchmesser ermittelt. Abbildung 3.39 zeigt die Verteilung. Die Durchmesser sind leicht rechts schief verteilt, wobei der mittlere Durchmesser bei ca. 20 nm und die Standardabweichung bei ca. 10 nm liegt. Dieses Ergebnis wurde mit einer Scheibenzentrifuge bestätigt (siehe Verteilung in Abb. 3.40).

3.3.2.2 Experimentelle Ergebnisse aus der Literatur

Abbildung 3.41 zeigt mittels AFM (Erläuterung des Messverfahrens siehe 3.3.2.3) gewonnene Aufnahmen einer Waferoberfläche nach dem Cu-CMP. Der Cu-CMP-Prozess, bei dem eine mit Kupfer beschichtete Siliziumoberfläche poliert wird, ist bei der Herstellung von integrierten Schaltkreisen anzutreffen. Beim Cu-CMP wird weiches Kupfer und nicht hartes Silizium abgetragen. Das dabei verwendete Poliermittel muss nicht SiO_2 -haltig sein, sondern es werden auch Al_2O_3 - bzw. Fe_2O_3 -Pigmente eingesetzt.

Auf den Aufnahmen b), c) und d) in Abbildung 3.41, die die Oberfläche polierter Wafer zeigen, sind deutlich „Mikrofurchen“ sichtbar. Das Erscheinungsbild der „Mikrofurchen“ variiert jedoch von Aufnahme zu Aufnahme. Lai (2001) assoziiert diese Beobachtung mit den verschiedenen, verwendeten Partikelgrößen.

Derartige Abtragsspuren sind auch in Abbildung 3.42, entnommen aus Jung und Singh (2004), zu erkennen. Jung und Singh (2004) führten Untersuchungen zum Effekt ver-

Differentielle und integrale Teilchengrößenverteilung - erstellt von BSD-ZAS

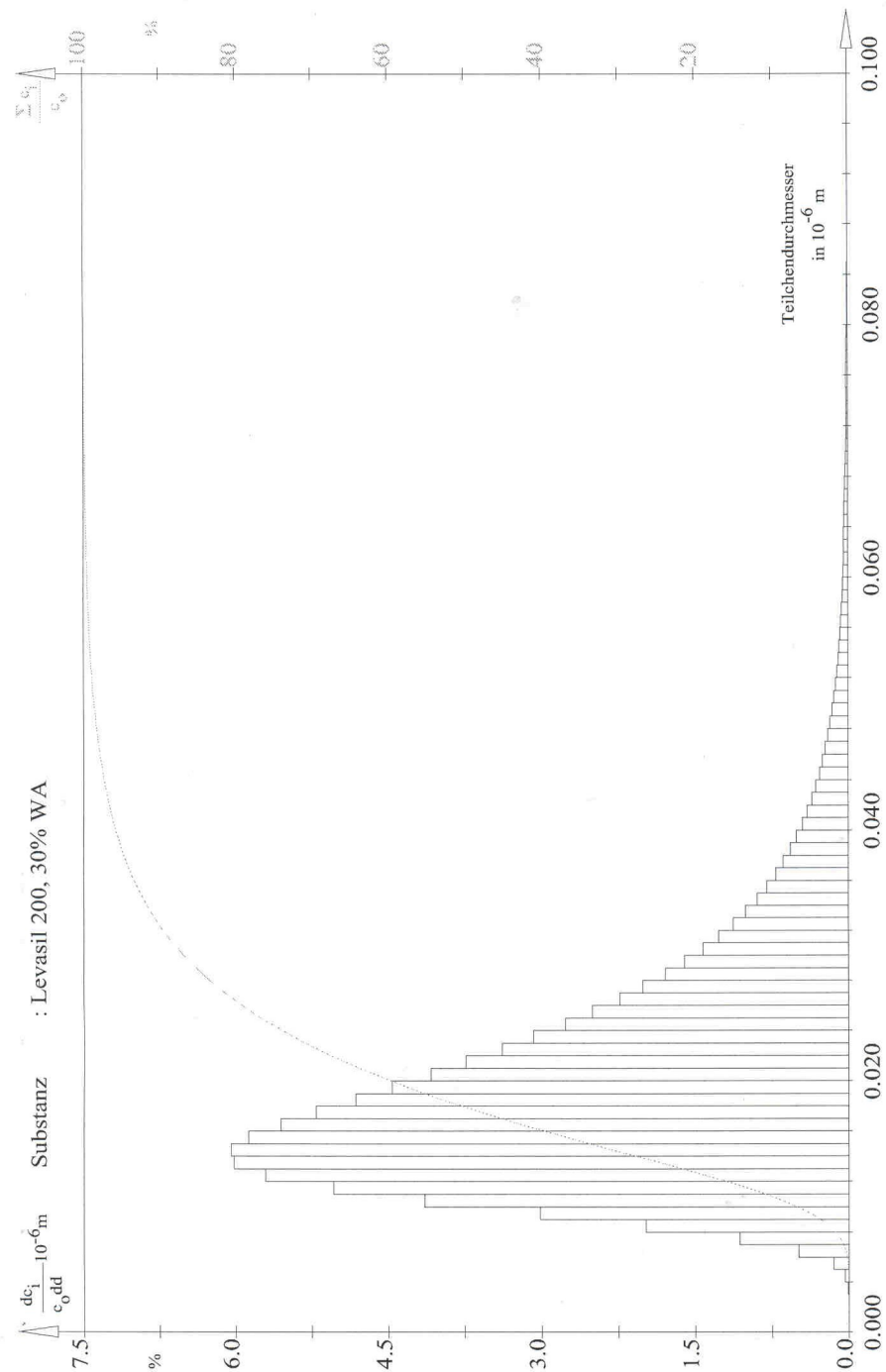


Abbildung 3.40: Verteilung der Durchmesser der Slurry-Partikel (Scheibenzentrifuge).

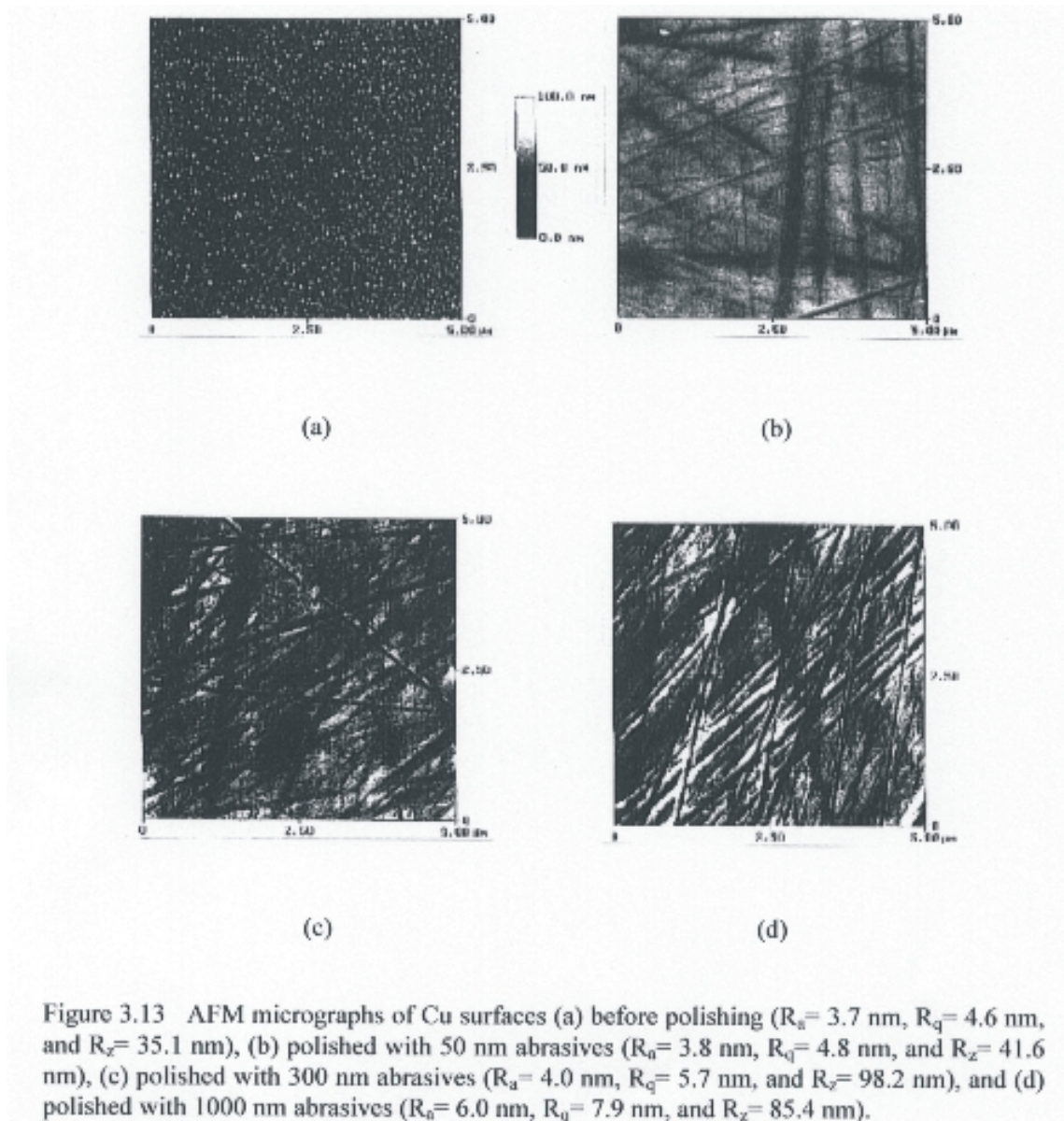


Abbildung 3.41: AFM-Aufnahmen polierter, kupferbeschichteter Siliziumoberflächen, $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ (Lai, 2001).

schiedener Slurry-Partikel im CMP (auch Cu-CMP) durch und erkannten, dass das Polieren mit Al_2O_3 -haltigem Slurry mit größeren Partikeln eine viel höhere Abtragsrate erzielte als das mit SiO_2 -haltigem Slurry mit kleineren Partikeln. Allerdings zeigten sich bei ersterem Slurry sehr viele „aggressive“ Mikrofurchen, die hohe Unebenheitswerte der Waferoberfläche verursachen.

Anhand derartiger Bilder und Ergebnisse liegt die Schlussfolgerung nahe, dass der Abtrag beim Cu-CMP mechanisch durch die Partikel im Slurry erzeugt wird. Die bisherige

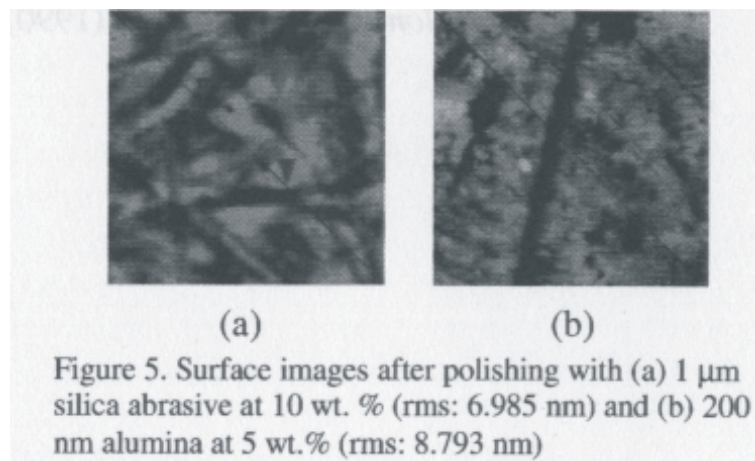


Abbildung 3.42: AFM-Aufnahmen polierter, kupferbeschichteter Siliziumoberflächen (Jung und Singh, 2004).

in der Literatur vorherrschende Meinung ist daher, dass aufgrund des Druckes und der Relativbewegung die in der Tuchoberfläche eingelagerten Partikel über die Waferoberfläche „geschliffen“ werden und dort „Mikrofurchen“ hinterlassen. Diese Mikrofurchen werden mit den in den AFM-Aufnahmen sichtbaren Abtragsspuren gleichgesetzt.

3.3.2.3 Ausgewählte Messverfahren zur Charakterisierung der Ebenheit der Waferoberfläche

In diesem Abschnitt werden zwei Messverfahren erläutert, mit denen in dieser Arbeit die Ebenheit der Waferoberfläche bestimmt wurde: Rasterkraftmikroskopie (vgl. Magonov und Whangbo, 1996) und Phasenverschiebungsinterferometrie.

Das Rasterkraftmikroskop (seltener Atomares Kraftmikroskop, engl. Atomic/Scanning Force Microscope, kurz AFM genannt) wurde 1986 von Gerd Binnig, Calvin Quate und Christoph Gerber (Binnig u. a., 1986) entwickelt und dient zur Untersuchung von Oberflächen bezüglich Rauheit und Defekten auf der Nanometerskala. Bei der Messung wird eine an einer Blattfeder befestigte Nadel über die Probenoberfläche geführt. Aus der Oberflächenstruktur resultiert dabei eine unterschiedliche Auslenkung bzw. Verbiegung der Blattfeder. Diese Verbiegung wird mithilfe eines Laserstrahls detektiert, der auf die Blattfeder gerichtet ist. Ein Detektor erfasst den reflektierten Laserstrahl, woraus dann ein dreidimensionales Oberflächenbild rekonstruiert wird. Mithilfe von AFM können extrem kleine Oberflächenstrukturen im atomaren Bereich sichtbar gemacht und

vermessen werden. Dafür ist die Untersuchung aber auf ein kleines Gebiet beschränkt (abhängig vom Gerät, hier max. $100\text{ }\mu\text{m} \times 100\text{ }\mu\text{m}$).

Für die Aufnahmen im Rahmen dieser Arbeit wurde das Gerät AFM VEECO D5000 verwendet. Gemessen wurde im Tapping-Modus mit einer Geschwindigkeit von 1 Hz. Der Verrundungsradius der Nadel beträgt 20 nm. Die Ergebnisse werden mit dem Filter „Autoflatten 1. und 3. Ordnung“ bearbeitet, um eine Verkippung der Messfläche und langwellige Beiträge in der Messung zu eliminieren.

Die Phasenverschiebungsinterferometrie dient ebenfalls zur Beurteilung von Oberflächen auf der Nanometerskala. Hierbei wird ein Lichtstrahl durch eine halbdurchlässige ebene Platte (Referenzfläche) auf die Oberfläche gelenkt. Der an der Referenzfläche reflektierte Lichtstrahl wird als Referenzstrahl bezeichnet, der durch die Platte durchgegangene und nun an der Messobjektoberfläche reflektierte Strahl als Objektstrahl. Durch Zusammenführen der beiden Strahlen entsteht abhängig von der Unebenheit der Messobjektoberfläche ein Interferenzmuster. Durch mehrere geregelte Verschiebungen der reflektierenden Referenzfläche werden nun dem Referenzstrahl bekannte Phasenverschiebungen zum Objektstrahl aufgeprägt, was zu mehreren unterschiedlichen Interferogrammen führt. Aus diesen wird mithilfe eines geeigneten Algorithmus' (siehe Greivenkamp und Bruning, 1992) die Topografie der Messobjektoberfläche rekonstruiert. Auf diese Topografie wird ein Hochpassfilter angewendet, um langwellige Beiträge (Form, Geometrie der Fläche) zu eliminieren und so die Nanotopografie „freizulegen“. Mit dieser Methode kann ein gesamter 300-mm-Wafer bezüglich Ebenheit im Nanometerbereich untersucht werden. Allerdings ist dafür die laterale Auflösung in der Größenordnung von 0,2 mm wesentlich kleiner als die des AFM-Gerätes.

Für die Aufnahmen im Rahmen dieser Arbeit wurde das Gerät ADE Phase Shift's NanoMapper FA mit dem Filter SQMM verwendet.

3.3.2.4 Ebenheit unterschiedlicher Wafer

Um das auf den chemisch-mechanischen Polierprozess von Siliziumwafern tatsächlich zutreffende stochastische Modell aus Kapitel 3.3.1 zu bestimmen sowie den Zusammenhang zwischen Ebenheit der Waferoberfläche und der Tuchoberfläche experimentell zu bestätigen, wurden Messungen an verschiedenen Waferoberflächen durchgeführt.

Probe	Messverfahren	Bemerkung
a	AFM	Wafer nach Politur mit ähnlichem Tuch wie Probe E (ideales Tuch), siehe Punkt 3.2.2.4
b	Interferometrie	Wafer nach Politur mit ähnlichem Tuch wie Probe E (ideales Tuch), siehe Punkt 3.2.2.4
c	Interferometrie	Wafer nach Politur mit ähnlichem Tuch wie Probe D (Poren sehr groß), siehe Punkt 3.2.2.4

Tabelle 3.7: Überblick über untersuchte Waferoberflächen mit Angabe des verwendeten Messverfahrens.

Tabelle 3.7 gibt einen Überblick über die untersuchten Wafer und das verwendete Messverfahren.

In Abbildung 3.43 ist die AFM-Aufnahme der Waferprobe a abgebildet. Es ist eine „unruhige wolkenartige“ Struktur ohne jegliche „Mikrofurchen“ zu sehen.

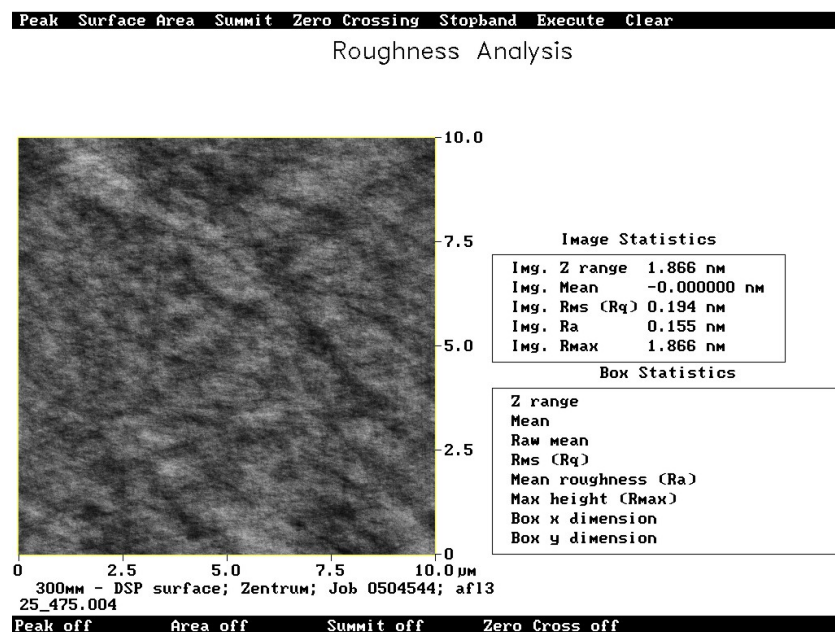


Abbildung 3.43: AFM-Aufnahme der Waferprobe a.

Abbildung 3.44 und 3.45 zeigen die Nanotopografien kompletter 300-mm-Waferoberflächen. Die Grauwertskala entspricht einer Höhenskalierung von ± 20 nm. Positionen mit einer Höhendifferenz von größer als 11 nm in einem Fenster der Größe 2 mm x 2 mm sind grün eingefärbt.

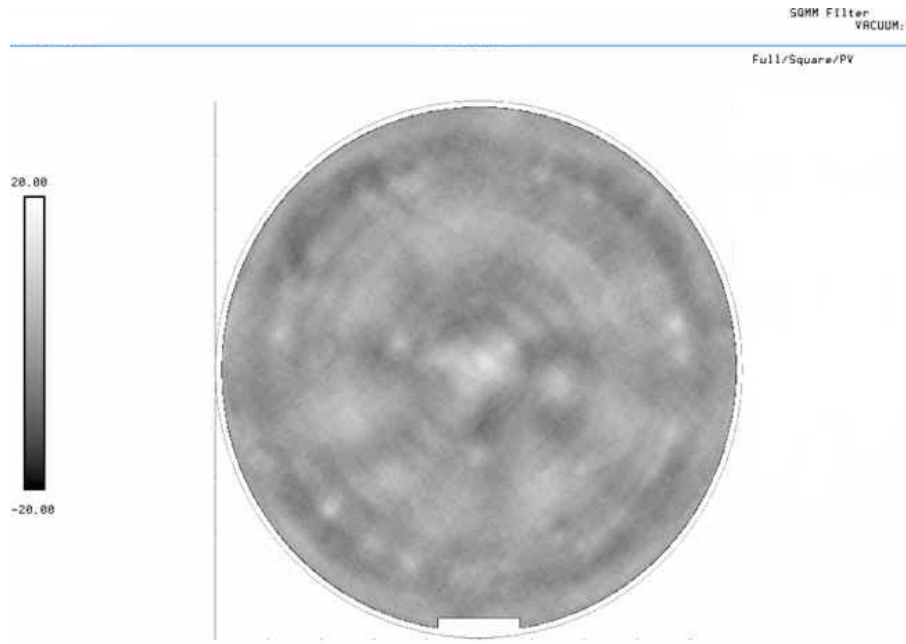


Abbildung 3.44: Interferometrische Aufnahme der Waferprobe b.

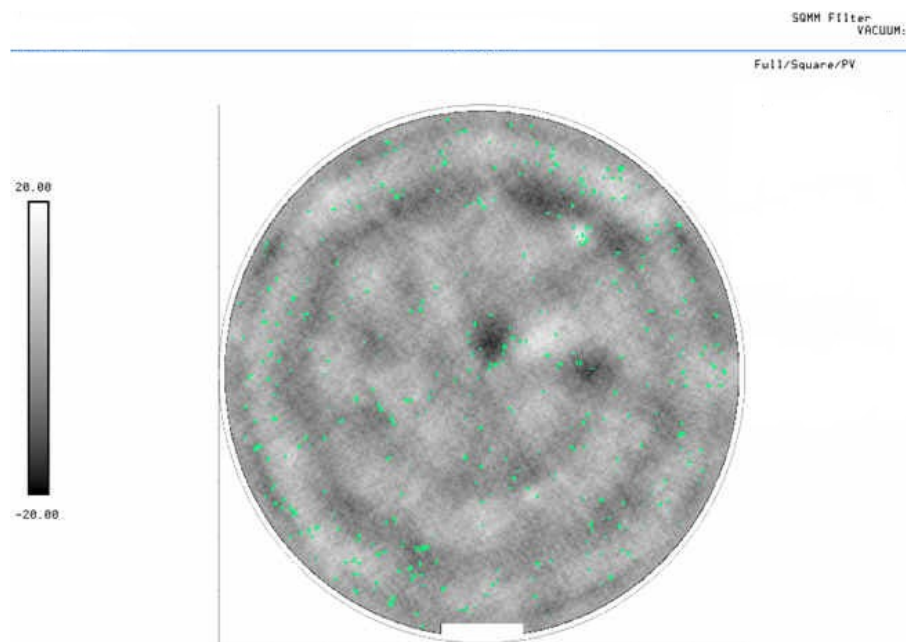


Abbildung 3.45: Interferometrische Aufnahme der Waferprobe c. Die grünen Punkte kennzeichnen lokale Flächen, in denen ein Höhenunterschied von > 11 nm auf einem Quadrat von 2 mm x 2 mm zu verzeichnen ist. Die größeren sehr dunklen Flächen sind langwelliger Natur und stammen von Vorprozessen — sie werden hier nicht betrachtet.

Aufnahme 3.44 stammt von einem Wafer, der mit einer idealen Tuchoberfläche poliert wurde. Es sind keine „unruhigen“ Strukturen erkennbar. Änderungen im Grauton sind nicht abrupt, sondern sehr sanft, der Grauton ist überwiegend im gleichen Bereich, was auf eine ebene, glatte Waferoberfläche schließen lässt. Es gibt keine grün eingefärbten Flächen, d. h. es existiert auf dem kompletten Wafer kein Fenster der Größe 2 mm x 2 mm, in dem die Höhendifferenz größer als 11 nm ist. Die größeren hellen Stellen sind langweiliger Natur, sodass sie hier nicht weiter beachtet werden müssen.

Aufnahme 3.45 stammt von einem Wafer, der mit einem Tuch mit hohem Porenanteil poliert wurde. Das Bild erscheint sehr „unruhig“. Es sind nanotopografische Strukturen auf kurzer Raumwellenlänge erkennbar, die bei dieser Grauwertskala als abrupte, schnell wechselnde Übergänge von dunklem Grau bis sehr hell, fast weiß zu sehen sind. Es gibt über den Wafer verteilt viele lokale Gebiete, in denen der Höhenunterschied größer als 11 nm ist. Daraus lässt sich schließen, dass die Waferoberfläche nicht glatt ist und Unebenheiten aufweist, die nicht nur lokal begrenzt sind, sondern sich über den kompletten Wafer verteilen.

3.3.3 Schlussfolgerungen

In diesem Abschnitt wird zunächst anhand der experimentellen Ergebnisse aus Kapitel 3.3.2.4 das tatsächlich für den CMP-Prozess von Siliziumwafern zutreffende stochastische Modell ausgewählt. Danach werden die erstmals mit dem Modell, d. h. mit einer Theorie, begründbaren Zusammenhänge zwischen Tuchrauheit und Unebenheit der Waferoberfläche sowie neu erkannte Wechselwirkungen zwischen den CMP-Einflussparametern herausgearbeitet. Ansätze für weitere aus dem Modell resultierende Optimierungen bilden den Abschluss dieses Kapitels.

3.3.3.1 Wahl eines geeigneten Modells anhand der experimentellen Ergebnisse

In diesem Kapitel wird anhand der AFM-Aufnahme in 3.3.2.4 gezeigt, welches der drei in Kapitel 3.3.1 vorgestellten mathematischen Modelle tatsächlich zutreffend für den hier vorliegenden Abtragsmechanismus beim CMP von Siliziumwafern ist.

In den Modellen „Geraden-Shot-Noise-Feld“ und „Geraden-Maximum-Feld“ wird davon

ausgegangen, dass Abtrag durch Mikrofurchen in der Oberfläche entsteht, die durch Partikel im Slurry verursacht werden. In Abbildung 3.38 sind solche Slurry-Partikel dargestellt. Von derartigen Partikeln verursachte Mikrofurchen müssten in AFM-Aufnahmen sichtbar werden. Dies zeigen die Abbildungen 3.41 und 3.42 aus der Literatur, in der die chemisch-mechanische Politur von mit Kupfer beschichteten Siliziumoberflächen untersucht wurde. Damit ist für die Prozesse, die diesen Aufnahmen zugrunde liegen, die Grundannahme der Modelle „Geraden-Shot-Noise-Feld“ und „Geraden-Maximum-Feld“ zutreffend. Diese Modelle wären für diese Polierprozesse anwendbar.

In der im Rahmen dieser Arbeit neu erstellten AFM-Aufnahme in Abbildung 3.43 für polierte Siliziumoberflächen sind keine derartigen Mikrofurchen sichtbar. Die AFM-Aufnahme 3.43 ähnelt hingegen stark der Simulation eines Additiven Booleschen Modells, vgl. Abbildung 2.20. Die beobachtete „unruhige, wolkenartige“ Struktur ergibt sich in der Simulation durch die additive Überlagerung der Körner des Booleschen Modells. Somit kann geschlossen werden, dass das Additive Boolesche Modell den hier untersuchten Abtragsmechanismus beim CMP von Siliziumwafern simulieren und somit letztlich auch beschreiben kann.

Alle drei Modelle haben somit ihre Berechtigung: Das „Geraden-Shot-Noise-Feld“ oder das „Geraden-Maximum-Feld“ kann als Modell für CMP-Prozesse mit überwiegend mechanisch abtragendem Anteil und nur geringer chemischer Komponente herangezogen werden (wie z. B. beim Cu-CMP). Die den Modellen zugrunde liegende scharfe Struktur der Mikrofurchen kann nur durch mechanischen Abtrag erzeugt werden. Für CMP-Prozesse hingegen, in denen die chemische Komponente einen maßgeblichen Anteil hat, sind keine derartigen Mikrofurchen zu finden. Es bildet sich vielmehr eine Oberfläche mit verschwommenen, „sanfteren“ Übergängen sowie einer „wolkenartigen“ Struktur aus, die durch ein Additives Boolesches Modell beschrieben werden kann.

3.3.3.2 Zusammenhang zwischen Tuchrauheit und Unebenheit der Waferoberfläche

In Kapitel 3.3.3.1 wurde das Additive Boolesche Modell zur Beschreibung der polierten Waferoberfläche anhand experimenteller Daten verifiziert. In diesem Kapitel werden nun sich aus dem Modell ergebende Zusammenhänge zwischen Tuchrauheit und Unebenheit der Waferoberfläche herausgestellt und durch Experimente bestätigt. Damit kann erst-

malig durch eine Theorie beschrieben und begründet werden, warum bei sehr rauem Tuch (hoher Porenanteil) auch die Waferoberfläche rau werden muss.

Aus dem Additiven Booleschen Modell ergibt sich gemäß Formel (3.15) für den Zusammenhang zwischen Unebenheit der polierten Waferoberfläche und der Tuchrauheit (vgl. Abb. 3.46):

$$\text{var} Z_t^H \sim \tau \cdot \bar{A} \cdot (\exp(2\tau\bar{A})), \quad (3.16)$$

wobei τ die mittlere Anzahl der Poren pro Flächeneinheit des Tuches und $\bar{A}$ die mittlere Fläche der typischen Pore ist.

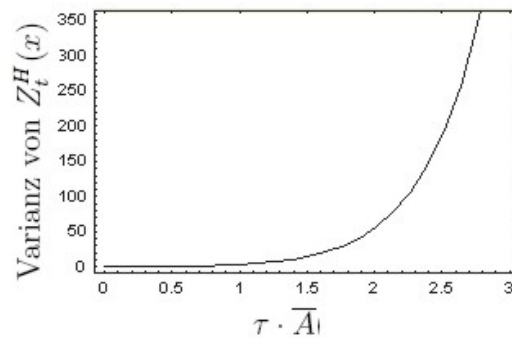


Abbildung 3.46: Zusammenhang zwischen Unebenheit der polierten Waferoberfläche (Varianz von $Z_t^H(x)$) und der Tuchrauheit ($\tau \cdot \bar{A}$, wobei τ die mittlere Anzahl der Poren pro Flächeneinheit des Tuches und $\bar{A}$ die mittlere Größe einer Pore ist). Als Proportionalitätsfaktor wurde 0,5 gewählt.

Aus Formel (3.16) folgt: Je höher der Porenanteil der Tuchoberfläche, desto höher ist die Unebenheit der polierten Waferoberfläche. Die Abhängigkeit ist nicht linear, sondern exponentiell. Für die Praxis bedeutet dies, dass sich bei hohem Porenanteil der Tuchoberfläche eine Veränderung dieses Porenanteils viel stärker auf die Ebenheit der Waferoberfläche auswirkt als Veränderungen bei geringem Porenanteil.

Die Experimente aus Kapitel 3.2.2.4 ergeben bestätigend: Der Porenanteil der Tuchprobe D in Abbildung 3.18 ist sehr hoch. Daher kann die polierte Waferoberfläche nach der Theorie nicht eben werden, was sich auch in der Realität gezeigt hat. In Abbildung 3.45 ist deutlich die „unruhige“ Struktur zu erkennen, die durch die Höhenschwankungen der Oberfläche erzeugt wird. Der mittlere Porenanteil der Tuchprobe E in Abbildung 3.19 müsste zu einer Waferoberfläche mit nur sehr geringer Unebenheit führen. Dies stimmt ebenfalls mit der Beobachtung im Experiment überein. In Abbildung 3.44 ist

die Struktur im Vergleich zu Abbildung 3.45 „ruhig“, ein gleichmäßiger Grauton lässt auf geringe Höhenschwankungen der Oberfläche schließen.

Tuchprobe H zeigt einen geringen Porenanteil. Da sich nach der Theorie eine Veränderung des Porenanteils bei höheren Feststoffanteilen nicht mehr so stark auf die Ebenheit der Waferoberfläche auswirkt, würde die entsprechende polierte Waferoberfläche ebenfalls nur geringe Unebenheiten aufweisen. Diese Hypothese hat sich ebenfalls durch Tuchprobe H und die beobachtete Ebenheit der Waferoberfläche in der Realität bestätigt. Auch auf die Proben von Porentüchern ist die Abhängigkeit anwendbar: Tuchprobe J erzeugt mit einem mittleren Porenanteil eine Waferoberfläche mit geringer Unebenheit, Tuchprobe K weist einen hohen Porenanteil auf, der eine Waferoberfläche mit hoher Unebenheit generiert.

Der oben benannte Zusammenhang zwischen Tuchrauheit und Ebenheit der Waferoberfläche deckt sich ebenfalls mit Erfahrungen in der Praxis, bei der für die Herstellung sehr ebener Oberflächen ein sogenanntes „Einfahren“ von neuen, noch rauen Fasertüchern notwendig ist. Das „Einfahren“ bewirkt bekanntlich eine Glättung der Tuchoberfläche bzw. eine „Verfüllung“ von Tuchporen, d. h. eine Verringerung des Porenanteils der Tuchoberfläche. Wie aus der Theorie abgeleitet, bewirkt in der Praxis der durch das Einfahren erzeugte geringere Porenanteil eine geringere Unebenheit der polierten Waferoberfläche.

3.3.3.3 Wechselwirkung zwischen CMP-Einflussparametern und Unebenheit der Waferoberfläche

Anhand der Gleichung (3.15) können neben der Abhängigkeit zwischen Tuchrauheit und Ebenheit der polierten Waferoberfläche weitere Zusammenhänge abgeleitet werden. Es soll nun auf die Wechselwirkung zwischen Druck und Tuch sowie zwischen Zeit und Tuch bezüglich der Ebenheit der polierten Waferoberfläche eingegangen werden.

Bezeichne s_D den Faktor der Druckerhöhung, u_t den Faktor der Zeiterhöhung und e_T den Faktor vor dem Ausdruck „ $\tau \bar{A} \exp(2\tau \bar{A})$ “, der ein Maß für den Porenanteil darstellt, dann ergibt sich aus Formel (3.15) folgender Zusammenhang zwischen diesen Faktoren, wenn die Varianz der Oberflächenhöhe gleich bleibt:

$$e_T = \frac{1}{s_D^2},$$

$$e_T = \frac{1}{u_t}.$$

Wird also der Druck erhöht, muss für eine gleichbleibende Unebenheit des Wafers der Porenanteil verringert, d. h. die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer erhöht werden. Diese Abhängigkeit ist jedoch nicht linear, sondern näherungsweise quadratisch.

Wird die Zeit verringert, muss für eine gleichbleibende Unebenheit des Wafers der Porenanteil erhöht, d. h. die Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer verkleinert werden. Es sei jedoch einschränkend darauf verwiesen, dass bei der Modellierung als Ausgangspunkt ein „glatter“ Wafer betrachtet wurde und somit die Abhängigkeit bei sehr kleinen t 's nur als grobe Näherung dienen kann. Bei großen t 's ist eine Sättigung der Unebenheit des Wafers mit steigender Zeit zu erwarten, was die obige Aussage ebenfalls von oben beschränkt.

3.3.3.4 Ansätze für weitere Optimierungen des Abtragsprozesses

In Kapitel 3.2.3.2 wurde bereits eine neue Optimierung des CMP-Prozesses aufgezeigt, indem Kriterien für ein ideales Poliertuch entwickelt und angegeben wurden. In diesem Abschnitt sollen nun anhand des in Kapitel 3.3.1.4 neu entwickelten und in 3.3.3.1 verifizierten Modells zur Beschreibung des Abtragsprozesses beim chemisch-mechanischen Polieren von Siliziumwafern weitere Optimierungsansätze aufgezeigt werden.

In der Praxis wird häufig beobachtet (vgl. auch Wenski u. a., 2003), dass mit höherem Druck auch die Unebenheit der polierten Waferoberfläche steigt. Daher wurde in der Vergangenheit der Druck reduziert, um bestimmten Anforderungen an die Ebenheit der polierten Waferoberfläche zu genügen. In der Praxis ist jedoch ein hoher Druck von Vorteil, da mit höherem Druck auch die Abtragsrate und somit die Produktivität steigt. Wie könnte nun die durch höheren Druck erzeugte Unebenheit der Waferoberfläche ausgeglichen werden? Nach der Theorie in 3.3.3.3 gleicht eine Verringerung des Porenanteils der Tuchoberfläche die Druckerhöhung bezüglich der Ebenheit aus. Es sollte jedoch darauf geachtet werden, dass der Porenanteil nicht so weit reduziert wird, dass chemische Stofftransporte behindert werden und somit wiederum die Abtragsrate sinkt.

In weiterführenden Forschungen könnten nun die mit dem in dieser Arbeit neu entwickelten Modell begründeten Zusammenhänge zwischen Einflussparametern und Ab-

tragsverhalten durch weitere experimentelle Untersuchungen konkretisiert werden. Die exponentielle Abhängigkeit der Ebenheit der polierten Waferoberfläche von der Tuchrauheit wurde im Rahmen dieser Arbeit qualitativ nachgewiesen. Hier könnte durch weitere Experimente für den jeweiligen Prozess ein ideales Intervall für die Porosität der Tuchoberfläche und des Druckes ermittelt werden. Des Weiteren bietet die Erforschung der Einzelkomponenten des Parameters c und deren Wirkungsweise die Möglichkeit, die chemischen Vorgänge des CMP-Prozesses besser zu verstehen und sodann anhand der Gleichung (3.15) den Prozess weiter zu optimieren.

4 Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde ein bei der Herstellung von Siliziumwafern verwendeter Prozess untersucht, der sich als Planarisierungsverfahren in der Halbleiterindustrie durchgesetzt hat: das chemisch-mechanische Polieren.

Dabei lag der Schwerpunkt auf einem der wesentlichen, noch nicht vollständig verstandenen Einflussparameter des CMP-Prozesses: dem Poliertuch. Anhand eines neu entwickelten Modells zur Beschreibung einer konditionierten Tuchoberfläche, der Kombination aus zufälliger abgeschlossener Menge und der Booleschen Funktion, wurden Zusammenhänge zwischen Konditionierparametern/Tuchstrukturparametern und resultierender Tuchoberfläche herausgearbeitet und somit Möglichkeiten zur exakten Beschreibung, vor allem aber der gezielten Beeinflussung der Tuchoberfläche ermittelt.

Weiterhin konnte mit diesem Modell erstmalig ein lang gesuchter messbarer Parameter benannt werden, mit dem eine ideale Tuchoberfläche charakterisierbar wird: die Dichtefunktion der Oberflächentiefe. Ein ideales Poliertuch zeichnet sich in der Endkonsequenz durch die Fähigkeit aus, eine geringe Unebenheit auf der polierten Waferoberfläche bei konstant hoher Abtragsrate zu erzielen. Anhand der Dichtefunktion wurden messbare Kriterien entwickelt, die ein ideales Poliertuch erfüllen muss. Hauptkriterien sind: eine schmale hohe Spitze in der Dichtefunktion, ein steiler Anstieg zur Spitze im linken Teil der Dichtefunktion, ein „Abknickpunkt“ in mittlerer Lage, in dem ein längerer flach abfallender rechter Teil der Funktion beginnt. Die ermittelten Kriterien wurden anhand experimenteller Untersuchungen an verschiedenen Tüchern mittels konfokaler Messtechnik verifiziert. Somit kann mit einer bewusst nach obigen Kriterien gestalteten Tuchoberfläche der CMP-Prozess optimiert und z. B. das Einfahren der Tücher verkürzt bzw. u. U. sogar unnötig werden.

Des Weiteren wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Abtragsmodell neu entwickelt, das den chemisch-mechanischen Polierprozess von Siliziumwafern beschreibt: das Additive

Boolesche Modell. Mit diesem Modell wurde zunächst nachgewiesen, dass im untersuchten Polierprozess ohne die chemische Komponente ein Abtrag in der erforderlichen Form nicht möglich wäre.

Anhand des Modells werden darüber hinaus erstmals Zusammenhänge zwischen der Tuchrauheit und der Unebenheit der Waferoberfläche mit einer Theorie begründbar. Eine durch das Modell gefundene exponentielle Korrelation zwischen Porenanteil und Unebenheit der Waferoberfläche konnte in ersten Versuchen qualitativ bestätigt werden.

Die zwei weiteren in diesem Zusammenhang mit entwickelten Abtragsmodelle Geraden-Shot-Noise-Feld und Maximum-Geraden-Feld, die für eine Beschreibung des CMP-Prozesses für Siliziumwafer nicht geeignet waren, liefern Optimierungspotenzial für andere Polierprozesse, in denen die mechanische Komponente überwiegt. Auch zur Beschreibung rein mechanischer Abtragsprozesse wie Läppen oder Schleifen können die Modelle angewendet werden. Sie bieten insbesondere die Möglichkeit, die Streuung des Abtrags mittels der in dieser Arbeit hergeleiteten Formeln zu beschreiben und Einflussparameter zu identifizieren.

5 Weitere Forschungsansätze

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mithilfe stochastischer Modelle neue Erkenntnisse bezüglich des Poliertuches und des Abtragsprozesses beim CMP erworben und dokumentiert. Damit wurde das vorhandene Wissen zu diesem Prozess erweitert, wobei sich durch diese Erweiterung wiederum neue Forschungsansätze eröffnen. Einige dieser Ansätze seien hier abschließend aufgeführt. Ihre Weiterverfolgung hätte jedoch den Rahmen dieser Arbeit gesprengt.

In Kapitel 3.2 wurde ein Modell entwickelt, das Zusammenhänge zwischen Konditionierparametern und Tuchoberfläche darlegt. Mit diesem Modell könnte nun die Wirkung verschiedener Konditionierelemente simuliert und mit den Ergebnissen der Konditionierprozess weiter optimiert werden.

Die in Kapitel 3.2.3.2 angegebenen Kriterien eröffnen die Möglichkeit, ein ideales Poliertuch zu designen. Einige Ansätze, wie eine derartige Poliertuchoberfläche konstruiert werden kann, wurden bereits in Kapitel 3.2.3.3 angeführt.

Eine weitere unbeantwortete Frage ist: „Was passiert während des Polierprozesses mit der Tuchoberfläche?“ Es wurde beobachtet, dass durch das Polieren bei Fasertüchern eine „Verfüllung“ der Poren stattfindet. Die dabei ablaufenden genauen chemischen Vorgänge bleiben zunächst weiter im Verborgenen.

In dieser Arbeit wurde die Kontaktfläche zwischen Wafer und Tuch als Ebene mit „Löchern“ beschrieben und verifiziert (vgl. 3.2.3.4). Die bisher in der Literatur herrschende Vorstellung einer Ebene mit „Buckeln“ wurde dennoch — und das exakter als bisher — modelliert, da nicht auszuschließen ist, dass Poliertücher der Zukunft auch dieser Beschreibung genügen könnten.

Letztlich könnte auch insbesondere für Prozesse, in denen die mechanische Komponente

die entscheidende Rolle beim Abtrag spielt, ein kombiniertes Modell aus Geraden-Shot-Noise-Feld und Geraden-Maximum-Feld sinnvoll sein. Dies entspräche der Vorstellung, dass abhängig von gewissen Randbedingungen einmal ein Partikel über eine andere Mikrofurche hinweggleitet und einmal die Mikrofurche — vielleicht auch nur zum Teil — vertieft.

Bezüglich des Abtragsprozesses beim CMP wurde in dieser Arbeit erstmals das Additive Boolesche Modell zur Beschreibung herangezogen und experimentell verifiziert. Durch dieses Modell wurde ein exponentieller Zusammenhang zwischen Tuchrauheit und Unebenheit der Waferoberfläche entdeckt. Es wäre nun von großem Interesse herauszufinden, wie sich detailliert die angenommene Konstante c im Additiven Booleschen Modell aus Einflussparametern wie Relativgeschwindigkeit, Slurry und Temperatur zusammensetzt. Mit derartigem Wissen würden sich viele weitere Optimierungsansätze ergeben, die mithilfe des Additiven Booleschen Modells simulierbar wären.

Anhang A: Statistische Verifizierung des Poisson-Geradenprozesses als Modell für die Mikrofurchenzentren

In diesem Anhang wird anhand der Simulation in Tso u. a. (2001) gezeigt, dass die Annahme eines Poisson-Geradenprozesses für die Bahnen der Slurry-Partikel auf der Waferoberfläche, d. h. für die Mikrofurchenzentren, gerechtfertigt ist.

In Tso u. a. (2001) wurden die Bahnen simuliert, die Slurry-Partikel auf der Waferoberfläche zurücklegen. Abhängig von verschiedenen Carriern (Carrier = Halterung/Träger/Führung der einzelnen Wafer) wurden verschiedene Muster auf der Waferoberfläche erzeugt.

Die in Tso u. a. (2001) simulierten Carrier A und B sind dadurch gekennzeichnet, dass keine Relativbewegung zwischen Carrier und Wafer zugelassen wird. Die erzeugten Muster waren parallele Bahnen oder Bahnen, die eine Herzform zeichnen. Im Carrier C kann sich der Wafer vor- und zurückbewegen, d. h. zu der Bewegung des Carriers wird eine Eigenbewegung des Wafers addiert. Bei diesem Carrier C wurden ungeordnete, zufällige Bahnen beobachtet. Da auch beim CMP-Prozess von Siliziumwafern der Wafer nicht starr im Carrier gehalten wird, sondern eine Bewegung stattfindet, ist für den hier betrachteten CMP-Prozess der simulierte Fall C repräsentativ.

Zur Beschreibung rein zufällig angeordneter Geraden ist als Modell der stationäre und isotrope Poisson-Geradenprozess geeignet. Die Annahme eines stationären und isotropen Poisson-Geradenprozesses wird anhand der Abbildung 5 in Tso u. a. (2001), siehe Abb. 5.1, mittels verschiedener statistischer Kriterien verifiziert. Dazu wird der Wafer

in kleine gleich große Quadrate unterteilt. Abbildung 5.1 zeigt eine repräsentative Simulation von Partikelbahnen auf der Waferoberfläche und die Unterteilung in kleine gleich große Quadrate.

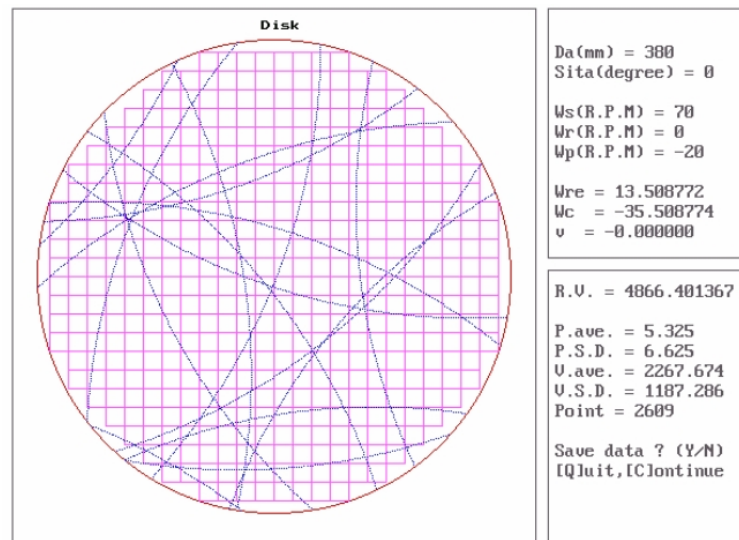


Abbildung 5.1: Simulation der Partikelbahnen auf der Waferoberfläche (Tso u. a., 2001).

Es werden drei Kriterien geprüft, die beim Vorliegen eines Poisson-Prozesses erfüllt sein müssten:

1. Gemäß der Ausführungen in Kapitel 2.1.3.5 und Formel (2.20) ist die Anzahl der Partikelbahnen in einem Quadrat Poisson-verteilt.
2. Der Winkel, den zwei sich schneidende Bahnen (hier approximiert durch Geraden) des Prozesses bilden, muss aufgrund der angenommenen Isotropie einer Gleichverteilung genügen (vgl. Stoyan u. a., 1995).
3. Die Anzahl der Seiten einer umschlossenen Fläche muss einer bestimmten Verteilung genügen (vgl. Stoyan u. a., 1995, S. 324 ff.)

Tabelle 5.1 zeigt die Ergebnisse für das Kriterium 1, Abbildung 5.2 die für das Kriterium 2 und Tabelle 5.2 die für das Kriterium 3.

Alle drei Kriterien wurden statistisch verifiziert, womit nichts gegen die Annahme eines Poisson-Geradenprozesses für die Mikrofurchenzentren auf der Waferoberfläche einzuwenden ist.

Anzahl i der Geraden in einem Quadrat	Anzahl der Quadrate mit i Geraden	$P(N_1 = i)$ berechnet mit geschätzter Intensität	$P(N_1 = i)$ geschätzt mittels der gezählten Anzahl
0	193	0,412	0,423
1	156	0,365	0,342
2	78	0,162	0,171
3	25	0,048	0,055
4	3	0,011	0,007
5	1	0,002	0,002

Tabelle 5.1: Kriterium 1: Zufällige Anzahl N_1 der Geraden in einem Quadrat. Die geschätzte Intensität der Poisson-Verteilung beträgt 0,866. Die Gesamtanzahl der Quadrate ist 456. Die mittels der gezählten Anzahl von Quadraten geschätzten Wahrscheinlichkeiten $P(N_1 = i), i = 1, 2, 3, 4, 5$, weicht nur geringfügig von den Wahrscheinlichkeiten ab, die aus der geschätzten Intensität berechnet wurde. Somit kann nichts gegen die Annahme einer Poisson-Verteilung für N_1 eingewendet werden.

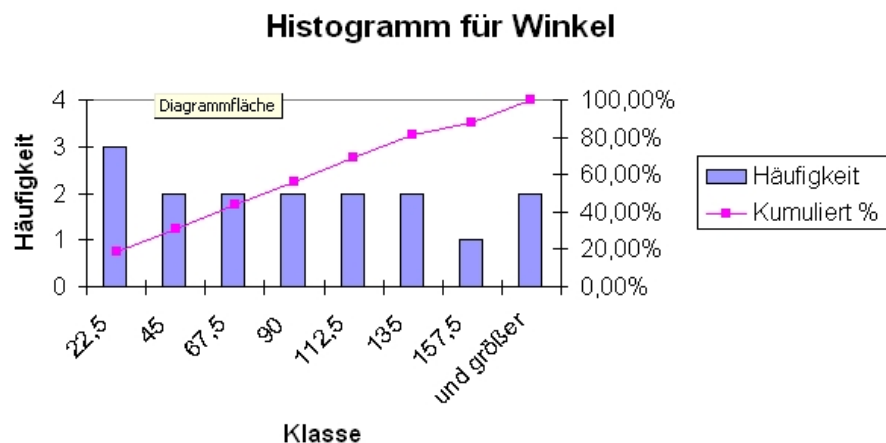


Abbildung 5.2: Histogramm der gemessenen Winkel bei zwei sich schneidenden Bahnen. Als Stichprobe wurde der Winkel an 16 Schnittpunkten gemessen. Der Wertebereich für den Winkel $(0, \pi]$ wurde in acht gleich große Klassen aufgeteilt. Jede Klasse hat annähernd die gleiche Anzahl von Winkeln, nämlich zwei, womit nichts gegen die Hypothese einer Gleichverteilung einzuwenden ist.

Anzahl i der Seiten einer um- schlossenen Fläche	$P(N_2 = i)$ berechnet nach Miles	$P(N_2 = i)$ berechnet nach Tanner	gezählte Flächen mit i Seiten	$P(N_2 = i)$ geschätzt mittels der gezählten Flächen
3	0,368	0,355	36	0,383
4	0,368	0,381	34	0,362
5	0,184	0,192	20	0,213
6	0,061	0,059	3	0,032
7	0,015	0,013	1	0,011

Tabelle 5.2: Kriterium 3: Zufällige Anzahl N_2 der Seiten einer umschlossenen Fläche. Die mittels der gezählten Anzahl von Seiten geschätzten Wahrscheinlichkeiten $P(N_2 = i), i = 3, 4, 5, 6, 7$, weichen nur geringfügig von den theoretischen Wahrscheinlichkeiten gemäß Miles bzw. Tanner (vgl. Stoyan u. a., 1995) ab. Somit kann nichts gegen die Annahme eines Poisson-Geraden-Prozesses für die Mikrofurchen eingewendet werden.

Anhang B: Hertz-Theorie für den elastischen Kontakt zwischen Wafer und einer Tucherhöhung mit Radius R_K

Zur Berechnung des Flächeninhaltes eines Kontaktkreises $b(o, r)$ zwischen Wafer und einer Tucherhöhung in Kapitel 3.3.1.2 ist die Kenntnis des Radius r notwendig. Für dessen Berechnung sei im Folgenden die Hertz-Theorie ausführlich erläutert (Johnson, 1985).

Zunächst wird die Geometrie der sich berührenden Oberflächen beschrieben. Der erste Berührungspunkt zwischen Tucherhöhung und Wafer sei der Ursprung eines kartesischen Koordinatensystems, bei dem wie gewohnt die (x, y) -Ebene die Tangentialebene zwischen den beiden Oberflächen und die z -Achse die Normale zu dieser Ebene (durch den Ursprung in Richtung der Tucherhöhung) ist. Dem Wafer entspricht ein nach oben unendlicher Halbraum, dessen untere glatte Abschlussebene $z_W(x, y) = 0$ ist. Die einzelne Tucherhöhung wird als ein nach unten unendlicher Halbraum modelliert, dessen obere Abschlussebene z_T wie folgt gegeben ist: Die Oberfläche der Tucherhöhung wird als so glatt betrachtet, dass ihr Profil im Gebiet um den Koordinatenursprung durch einen Ausdruck der Form

$$z(x, y) = Ax^2 + By^2 + Cxy + \dots, \quad A, B, C, x, y, z \in \mathbb{R} \quad (5.1)$$

beschrieben werden kann. Terme höherer Ordnung können dabei vernachlässigt werden. Wird die Orientierung der x - und y -Achse so gewählt, dass der xy -Term verschwindet, kann (5.1) folgendermaßen für die Oberfläche z_T einer einzelnen Tucherhöhung mit

Radius R_K formuliert werden:

$$z_T(x, y) = \frac{1}{2R_K}x^2 + \frac{1}{2R_K}y^2,$$

wobei R_K der Radius der Hauptkrümmungen im Ursprung ist (vgl. Differentialgeometrie: In der Differentialgeometrie weist man jedem Punkt einer gekrümmten Fläche zwei Krümmungsradien zu, einen maximalen und einen minimalen. Die Kehrwerte der Radien werden als Hauptkrümmungen bezeichnet).

Die beiden Oberflächen haben eine gemeinsame x - und y -Achse, sodass der Abstand zwischen den beiden Oberflächen durch

$$h(x, y) = z_W(x, y) - z_T(x, y) = z_T(x, y) = \frac{1}{2R_K}x^2 + \frac{1}{2R_K}y^2 \quad (5.2)$$

gegeben ist. Es sei angemerkt, dass die relative Krümmung $1/R_K$ groß im Vergleich zu den in (5.1) vernachlässigten Termen höherer Ordnung ist.

Nun wird die elastische Verformung der Tucherhöhung bei einem Druck q_0 betrachtet. Ein Punkt T im Inneren der Tucherhöhung verschiebt sich beim Druck q_0 um den Wert δ parallel zur z -Achse in Richtung des Ursprungs. Ein sich auf der Oberfläche befindlicher Punkt $S(x, y, z)$ innerhalb der späteren Kontaktfläche wird dagegen nur um den Wert u_z (positiv ins Innere der Tucherhöhung gemessen) parallel zur z -Achse verschoben. Vor der Verformung war dessen Abstand durch Gleichung (5.2) gegeben. Wenn nun nach der Verformung der Punkt $S(x, y, \tilde{z})$ innerhalb der Kontaktfläche mit der Waferoberfläche $z_W(x, y, z) = 0$ zusammenfällt, dann ist

$$u_z + h = \delta.$$

Unter Verwendung von (5.2) ergibt sich für die elastische Verschiebung des Punktes $S(x, y, z)$ innerhalb der späteren Kontaktfläche

$$u_z = \delta - Ax^2 - By^2. \quad (5.3)$$

Liegt $S(x, y, z)$ außerhalb der späteren Kontaktfläche, sodass er beim Druck q_0 nicht mit der Waferoberfläche $z_W(x, y, z) = 0$ zusammenfällt, folgt:

$$u_z > \delta - Ax^2 - By^2. \quad (5.4)$$

Im nächsten Schritt muss die Druckverteilung zwischen den sich gegenseitig berührenden Oberflächen bestimmt werden, sodass die resultierende elastische Verschiebung u_z des

Tuches innerhalb der Kontaktfläche der Gleichung (5.3) und außerhalb der Kontaktfläche der Gleichung (5.4) genügt.

Für den hier benötigten Fall rotationssymmetrischer Körper ist die Kontaktfläche kreisförmig mit zunächst noch unbekanntem Radius r (vgl. Johnson, 1985, S. 87). Gleichung (5.3) kann hierfür wie folgt vereinfacht werden:

$$u_z = \delta - \left(\frac{1}{2R_K} \right) a^2, \quad a \leq r,$$

wobei R_K die relative Krümmung der Tucherhöhung und $a^2 = x^2 + y^2$ ist.

Eine Druckverteilung, die obige Verschiebung verursacht, lautet (vgl. Johnson, 1985):

$$q(a) = q_0(1 - (a/r)^2)^{1/2}, \quad (5.5)$$

wobei die verursachte Gesamtverschiebung (in Normalenrichtung) auch wie folgt angegeben wird:

$$u_z = \frac{1 - \nu^2}{E} \frac{\pi q_0}{4r} (2r^2 - a^2), \quad a \leq r, \quad (5.6)$$

mit ν Poissonzahl und E Elastizitätsmodul des Körpers, auf den Druck ausgeübt wird. (Auf die Herleitung der Druckverteilung (5.5) wird hier verzichtet, siehe dazu Johnson, 1985, § 3.4. In Johnson (1985), S. 93, wird zudem gezeigt, dass eindeutig nur die Druckverteilung (5.5) Gleichung (5.3) erfüllen kann. Weiterhin wird ebenfalls überprüft, dass (5.5) gleichzeitig der Gleichung (5.4) genügt und sich somit die zwei Oberflächen auch wirklich in keinem anderen Punkt außerhalb der betrachteten Kreisfläche berühren.)

Da auf Wafer und Tucherhöhung wechselseitig der gleiche Druck wirkt, wird für $\frac{1-\nu^2}{E}$ ein kombinierter Materialwert E^* eingeführt:

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_W^2}{E_W} + \frac{1 - \nu_P^2}{E_P},$$

wobei

- ν_W ... Poissonzahl des Wafers,
- E_W ... E-Modul des Wafers,
- ν_P ... Poissonzahl der Tucherhöhung,
- E_P ... E-Modul der Tucherhöhung ist.

Durch Einsetzen von $u_z = \delta - (\frac{1}{2R_K})a^2$ in (5.6) ergibt sich:

$$\frac{\pi q_0}{4rE^*}(2r^2 - a^2) = \delta - \left(\frac{1}{2R_K}\right)a^2. \quad (5.7)$$

Mit dieser Gleichung können nun die Größen zur Beschreibung der Verformung bestimmt werden: Der Radius r des Kontaktkreises ergibt sich beispielsweise aus (5.7) durch Einsetzen von $a = r$ und $\delta = 0$:

$$r = \frac{\pi q_0 R_K}{2E^*}. \quad (5.8)$$

Die Annäherung δ eines Punktes T an die Waferoberfläche bzw. die maximale Verformung δ der Tucherhöhung im Nullpunkt erhält man durch Einsetzen von $a = 0$ in (5.7):

$$\delta = \frac{\pi r q_0}{2E^*} = \frac{r^2}{R_K} \quad (5.9)$$

bzw. durch Einbeziehen des lokalen Drucks q ($q = \int_0^r q(a)2\pi a da = 2/3 q_0 \pi r^2$):

$$\delta = \left(\frac{9q^2}{16R_K E^*}\right)^{1/3}. \quad (5.10)$$

Die Kontaktfläche zwischen einer Tucherhöhung und dem Wafer ist also abhängig vom ausgeübten Druck, den Materialeigenschaften von Tuch und Wafer und vom Radius einer Tucherhöhungskappe.

Abkürzungsverzeichnis

Abb.	Abbildung
AFM	Rasterkraftmikroskopie
bzw.	beziehungsweise
CMP	chemisch-mechanisches Polieren
Cu-CMP	chemisch-mechanisches Polieren von mit Kupfer beschichteten Siliziumoberflächen
d. h.	das heißt
FE	Flächeneinheit
FILK	Forschungsinstitut für Leder und Kunststoffbahnen
Kap.	Kapitel
konst.	konstant
o. ä.	oder ähnlichem
REM	Rasterelektronenmikroskopie
resp.	respektive
TEM	Transmissionselektronenmikroskopie
u. a.	und andere(s) bzw. unter anderem
u. U.	unter Umständen
vgl.	vergleiche
z. B.	zum Beispiel

Symbolverzeichnis

Dieses Verzeichnis enthält die in dieser Arbeit verwendeten Symbole. Dabei wurden solche Symbole, die nur lokal benutzt wurden, ausgelassen.

a	halbe Breite des Konditionierelementes
A_A	Flächenanteil, speziell Kontaktflächenanteil zwischen Tuch und Wafer
A_r	reale Kontaktfläche zwischen Tuch und Wafer
$\overline{A}$	mittlerer Flächeninhalt einer typischen Pore
B	zufällige halbe Breite der Mikrofurchen
$\mathcal{C} = (0, \pi] \times \mathbb{R}$	Parameter- oder Repräsentationsraum
$C(\cdot)$	Kovarianz
c	konstanter Faktor
d, d_1	Abstandsfunktionen
d_0	Abstand zwischen mittlerer Tuchebeine und Wafer beim Einsprühen des Slurry
d_2	mittlerer Abstand zwischen zwei Konditionierelementen
d_{WT}	Abstand zwischen Wafer und mittlerer Tuchebeine
$\mathbf{E}$	Erwartungswert
$\mathbf{ED}$	mittlerer Durchmesser eines Partikels
$\mathbf{ED}_A$	mittlerer Durchmesser eines am Abtrag beteiligten Partikels
E^*	abgeleitetes E-Modul
E_P	E-Modul des Tuches
E_W	E-Modul des Wafers
e_n	Niveau ($\in \mathbb{R}$)
$F(\cdot)$	Verteilungsfunktion
F_{SW}	mittlere Kraft zwischen einem Partikel und dem Wafer

$f(\cdot), \bar{f}(\cdot)$	Funktion
$f_n(z)$	Dichtefunktion der Oberflächentiefe eines Tuches ohne Poren
f_Q	Querschnittsprofil der Mikrofurchen
$g(\cdot)$	Funktion
H_l	lineare Kontaktverteilungsfunktion
H_s	sphärische Kontaktverteilungsfunktion
H_W	Härte des Wafers
h	Tiefe des Konditionierelementes
$\mathcal{K}$	zweites reduziertes Momentenmaß
K	beliebige kompakte Menge des $\mathbb{R}^d$
k	Gewichtsfaktor
k_p	eine Konstante, die andere beteiligte Medien/Einflussfaktoren enthält $[\frac{\mu m^2}{N}]$
L	Restsehnenlänge
L_A	Liniendichte eines Geradenprozesses
$\bar{l}$	mittlere Sehnenlänge
$l \ (l_i, l'_i)$	Gerade im $\mathbb{R}^2$
M	Markenraum
m, m_i	Marke einer Geraden l
$\mathcal{M}$	Markenverteilung
M_r	Materialabtragsrate $[\frac{\mu m}{s}]$
M_i	Zentrum des Konditionierelementes zur Zeit i
n	diskretisierte Zeit
o	Koordinatenursprung, Nullpunkt
P	Wahrscheinlichkeit
P_{max}	Wahrscheinlichkeit, dass ein Partikel groß genug ist, um Abtrag zu bewirken
$p \ (p_i, p'_i)$	Normalenabstand einer Geraden l zum Ursprung o
q_0	ausgeübter Druck $[\frac{N}{\mu m^2}]$
$\mathbb{R}^d$	d -dimensionaler euklidischer Raum
$\mathcal{R}$	Richtungsrose eines Geradenprozesses
R_θ	Rotation im $\mathbb{R}^2$ mit Winkel θ
R_K	Krümmungsradius einer Tucherhöhung
R_Z	Radius eines Zylinders
R_C	die der Rotation im $\mathbb{R}^2$ entsprechende Transformation in $\mathcal{C}$
$\bar{R}$	mittlere halbe Streifenbreite
(r, φ)	Punkt des $\mathbb{R}^2$, gegeben in Polarkoordinaten

$T_{(r,\varphi)}$	Translation im $\mathbb{R}^2$, die o in den Punkt (r, φ) überführt
$T_{\mathcal{C}}$	die der Translation im $\mathbb{R}^2$ entsprechende Transformation in $\mathcal{C}$
t	Zeit
$U(K)$	Umfang der kompakten Menge K
v	Relativgeschwindigkeit $[\frac{\mu m}{s}]$
$V_i(r)$	Tiefe des Konditionierelementes in r zur Zeit i
V_V	Volumenanteil, speziell des Feststoffes eines Poliertuches
var	Varianz
W	zufällige Tiefe der Mikrofurchen
$w(\cdot)$	Funktion
$X_z(f)$	Menge aller Punkte x mit $f(x) \geq z$
$Z(\mathbf{x})$	Wert einer Zufallsgröße Z in $\mathbf{x}$
$\{Z(\mathbf{x})\}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$	Zufallsfeld
$Z_n(\mathbf{x})$	Oberflächentiefe des Tuches im Punkt $\mathbf{x}$ nach n Rotationen des Tuches
$Z_n^*(\mathbf{x})$	Oberflächentiefe eines konditionierten porösen Tuches
$Z_t(\mathbf{x})$	erreichte Oberflächentiefe des Wafers am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t
$Z_t^H(\mathbf{x})$	Höhe des nicht abgetragenen Materials am Punkt $\mathbf{x}$ zur Zeit t
$\alpha (\alpha_i, \alpha'_i)$	Winkel der Geraden l mit der x_1 -Achse
$\alpha^{(2)}$	zweites faktorielles Momentenmaß
$\gamma_{\Xi_P}(r)$	Mengenkovarianz des Poisson-Streckenprozesses
ε	Intensität der Partikel im Slurry $[1/\text{mm}^3]$
η	mittlere Anzahl der Tucherhöhungen pro FE Tuch
$\eta_{\Phi_{Tv}}$	mittlere Anzahl der Kontaktkreise pro FE Tuch
Υ	Punktprozess im $\mathbb{R}^1$
Λ	Intensitätsmaß
λ	Intensität eines Punktprozesses
λ_2	Parameter der linearen Kontaktverteilungsfunktion
λ_P	mittlere Anzahl der am Abtrag beteiligten Partikel pro FE des Tuches = Intensität eines Punktprozesses
μ	lokal endliches Maß auf $\mathcal{C}$
$\mu^{(1)}$	erstes Momentenmaß
$\mu^{(2)}$	zweites Momentenmaß

ν	eindimensionales Lebesgue-Maß
ν_d	d -dimensionales Lebesgue-Maß
ν_P	Poisson-Zahl des Tuches
ν_W	Poisson-Zahl des Wafers
Ξ, Ξ_i	zufällige abgeschlossene Menge
Ξ_G	Poisson-Streifenprozess
Ξ_P	Poisson-Streckenprozess
τ	Intensität der Poren (= mittlere Anzahl der Poren pro FE Tuch)
Φ	Punktprozess im $\mathbb{R}^d$
Φ_m	markierter Punktprozess
Φ_T	Poisson-Prozess der Zentren der Tucherhöhungen mit Intensität η
Φ_{Tv}	Poisson-Prozess der Zentren der Kontaktkreise mit Intensität $\eta_{\Phi_{Tv}}$
Ψ	Geradenprozess im $\mathbb{R}^d$
Ψ_m	markierter Geradenprozess
$b(o, r), b(o, R)$	Kreis mit Radius $r \geq 0$ bzw. $R \geq 0$
$\#$	Anzahl
$\mathbf{1}(\cdot)$	Indikatorfunktion
$\oplus$	Minkowski-Addition
$\ominus$	Minkowski-Subtraktion
$\ \cdot\ $	euklidische Norm

Tabellenverzeichnis

2.1	Hauptelemente des Geraden-Shot-Noise-Feldes im Vergleich zu den Hauptelementen des klassischen Shot-Noise-Prozesses.	37
2.2	Erwartungswerte für das Geraden-Shot-Noise-Feld mit verschiedenen Wirkungsprofilen.	41
2.3	Eindimensionale Verteilungsfunktion für das Geraden-Maximum-Feld mit ausgewählten Wirkungsprofilen.	53
3.1	Ergebnisse des Laborversuchs zur Abgrenzung der chemischen und der mechanischen Abtragskomponente beim CMP. Exakte Lösungszusammensetzungen können aus Geheimhaltungsgründen nicht angegeben werden; sie liegen der Siltronic AG vor.	70
3.2	Auflistung der untersuchten Tuchproben mit Tuchtyp, Beurteilung der Abtragsrate, Beurteilung der Ebenheit der polierten Waferoberfläche und weiteren Bemerkungen.	88
3.3	Grundlegende Ansätze aus der Fachliteratur zur Bestimmung des Kontaktfächenanteils.	121
3.4	Bestimmung der Tiefe W und der Breite $2B$ einer Mikrofurche: Vergleich des Ansatzes von Luo und Dornfeld (2001) mit dem von Zhao und Chang (2002) bezüglich der angenommenen Verformungsarten.	129
3.5	Bestimmung der Tiefe W und der Breite $2B$ einer Mikrofurche: Vergleich der Formeln und unabhängigen Variablen von Luo und Dornfeld (2001) und Zhao und Chang (2002).	130
3.6	Vergleich von drei theoretisch möglichen stochastischen Modellen für den Abtragsprozess beim CMP.	142
3.7	Überblick über untersuchte Waferoberflächen mit Angabe des verwendeten Messverfahrens.	149

- 5.1 Kriterium 1: Zufällige Anzahl N_1 der Geraden in einem Quadrat. Die geschätzte Intensität der Poisson-Verteilung beträgt 0,866. Die Gesamtanzahl der Quadrate ist 456. Die mittels der gezählten Anzahl von Quadraten geschätzten Wahrscheinlichkeiten $P(N_1 = i), i = 1, 2, 3, 4, 5$, weicht nur geringfügig von den Wahrscheinlichkeiten ab, die aus der geschätzten Intensität berechnet wurde. Somit kann nichts gegen die Annahme einer Poisson-Verteilung für N_1 eingewendet werden. iii
- 5.2 Kriterium 3: Zufällige Anzahl N_2 der Seiten einer umschlossenen Fläche. Die mittels der gezählten Anzahl von Seiten geschätzten Wahrscheinlichkeiten $P(N_2 = i), i = 3, 4, 5, 6, 7$, weichen nur geringfügig von den theoretischen Wahrscheinlichkeiten gemäß Miles bzw. Tanner (vgl. Stoyan u. a., 1995) ab. Somit kann nichts gegen die Annahme eines Poisson-Geraden-Prozesses für die Mikrofurchen eingewendet werden. iv

Abbildungsverzeichnis

2.1	Eine Menge von Kreisflächen mit zufälligen Mittelpunkten und Radien (schwarz) ist beispielsweise eine zufällige abgeschlossene Menge. Speziell wird hier eine Simulation eines Booleschen Modells mit kreisförmigen Mengen gezeigt.	4
2.2	Die zufällige abgeschlossene Menge ist grau dargestellt. Wenn o nicht zur Menge Ξ gehört, betrachtet man die vertikale Linie L von o bis zum ersten Kontakt mit Ξ . Die Länge des Liniensegmentes ist eine Zufallsvariable mit der linearen Kontaktverteilungsfunktion H_l	5
2.3	Jeder Geraden l im $\mathbb{R}^2$ werden eineindeutig Parameter α und p zugeordnet (Hessesche Normalform): $\alpha \in (0, \pi]$ ist der Winkel der Geraden l mit der x_1 -Achse der Ebene, $p \in \mathbb{R}^1$ ist der Normalenabstand der Geraden l zum Ursprung. Im linken Beispiel ist p positiv, da der Koordinatenursprung links von l liegt; im rechten Beispiel ist p negativ.	10
2.4	Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 im $\mathbb{R}^2$ mit Abstand p_i zum Koordinatenursprung und Winkel α_i . Rechts: Die den Geraden l_1, l_2, l_3 entsprechenden Punkte $(\alpha_1, p_1), (\alpha_2, p_2), (\alpha_3, p_3)$ in $\mathcal{C}$	10
2.5	Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 (schwarz) im $\mathbb{R}^2$. Diese drei Geraden werden um den Vektor $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ mit $r = \ \mathbf{r}\ $ und Winkel φ (blau) verschoben, woraus die roten Geraden l'_1, l'_2, l'_3 resultieren. Rechts: Die entsprechenden Punkte in $\mathcal{C}$. Bei einer Translation $T_{(r, \varphi)}$ von Geraden im $\mathbb{R}^2$ verändern sich die Abstände der Geraden von p_i zu p'_i abhängig vom Abstand p_i und vom Winkel α_i der Ausgangsgeraden l_i , während die α -Koordinate gleich bleibt. Eine Translation $T_{(r, \varphi)}$ im $\mathbb{R}^2$ führt also zu einer (unterschiedlichen) Bewegung der Punkte in $\mathcal{C}$ in p -Richtung ($T_{\mathcal{C}}$).	11

2.6	Links: Drei Geraden l_1, l_2, l_3 (schwarz) im $\mathbb{R}^2$. Diese drei Geraden werden um den Koordinatenursprung o mit dem Winkel θ gedreht, woraus die roten Geraden l'_1, l'_2, l'_3 resultieren. Rechts: Die entsprechenden Punkte in $\mathcal{C}$. Bei einer Rotation R_θ von Geraden im $\mathbb{R}^2$ verändert sich der Winkel α_i zu $\alpha'_i = (\alpha_i + \theta) \bmod \pi$, während der Abstand der Geraden teilweise sein Vorzeichen ändert.	12
2.7	Simulation eines Poisson-Geradenprozesses: a) Poisson-Punktprozess in $\mathcal{C}$, b) Darstellung der entsprechenden Geraden im $\mathbb{R}^2$	19
2.8	Veranschaulichung des Konstruktionsprinzips eines Poisson-Streifenprozesses: Als Beispiel wird die Gerade l_1 eines Poisson-Geradenprozesses betrachtet. Jeder Punkt der Geraden l_1 ist Mittelpunkt eines Kreises mit Radius R_1 . Die grau unterlegte Fläche ist ein Streifen, d. h. die Vereinigung der Geraden und der Kreise: $l_1 \oplus b(o, R_1)$	23
2.9	Der Poisson-Streifenprozess Ξ_G entspricht im Parameterraum $\mathcal{C}$ dem Poisson-Streckenprozess Ξ_P mit parallelen Strecken. Dieser Streckenprozess ist ein Spezialfall des Booleschen Modells (beschränkt auf den Raum $\mathcal{C}$), wobei die Strecken gerade die Körner sind.	23
2.10	Veranschaulichung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ für $0 \leq r \leq 2R$, mit $(r, \varphi) = (1, 0)$ und $R = \text{konst.} = 2$: Die Mengenkovarianz entspricht dem Inhalt der grünen Fläche, der sich durch Subtraktion des Flächeninhalts der schraffierten Fläche vom Inhalt $2R\pi$ der Rechtecksfläche $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \pi], p \in [-R, +R]\}$ ergibt. Der Flächeninhalt der schraffierten Fläche entspricht dem Integral $\int_0^\pi \sin \alpha \, d\alpha$ (allgemein: $\int_\varphi^{\pi+\varphi} r \sin(\alpha - \varphi) \, d\alpha$). . .	31
2.11	Veranschaulichung der Mengenkovarianz $\gamma_{\Xi_P}(r, \varphi)$ für $r > 2R$, mit $(r, \varphi) = (6, 0)$ und $R = \text{konst.} = 2$: Die Mengenkovarianz entspricht dem Inhalt der grünen Fläche. Aufgrund der Achsensymmetrie von „ $r \sin(\alpha - \varphi)$ “ wird nur der Flächeninhalt der linken grünen Fläche betrachtet. Das Doppelte dieses Flächeninhalts ist dann γ_{Ξ_P} . Der Flächeninhalt der linken grünen Fläche ergibt sich durch Subtraktion des Flächeninhalts der schraffierten Fläche vom Inhalt der Rechtecksfläche $\{(\alpha, p) : \alpha \in (0, \arcsin(2R/r)], p \in [-R, +R]\}$. Der Flächeninhalt der schraffierten Fläche entspricht dem Integral $\int_0^{\arcsin(2R/r)} 6 \sin \alpha \, d\alpha$ (allgemein: $\int_\varphi^{\varphi+\arcsin(2R/r)} r \sin(\alpha - \varphi) \, d\alpha$). . .	31
2.12	Kovarianz $C(r)$ eines Poisson-Streifenprozesses Ξ_G mit Liniendichte $L_A = 1$ und konstanter halber Streifenbreite $R = 2$	32

2.13	Oben: Die Punkte x_1 bis x_5 sind rein zufällig auf einer Linie angeordnet. Jeder Punkt bildet das Zentrum einer zufälligen Funktion $f_{B_i}(x)$, hier Dreiecksfunktionen. Unten: Überlagern sich an einem Punkt der Linie zwei Funktionen, so wird das Maximum der beiden Funktionswerte gebildet. Die resultierende Funktion ist dann eine Boolesche Funktion. . .	33
2.14	Beispiele für die Funktion g (von links nach rechts): Rechtecksfunktion, Dreiecksfunktion, Halbkreisfunktion, quadratische Funktion.	41
2.15	Veranschaulichung der Bedeutung des Winkels von Geraden für die Kovarianzfunktion des Poissonschen Geraden-Shot-Noise-Feldes für große r : Nur wenn eine Gerade einen bestimmten Winkel α hat, sind die Abstände von o und $\mathbf{r}$ zu dieser Geraden so klein, dass beide Abstände in der Trägermenge von f liegen. Im Beispiel ist die beschränkte Trägermenge K_A der Funktion f bezüglich der zwei Geraden durch dünnere Linien eingezeichnet. Der Wert der Funktion f bezüglich der Geraden l_1 mit Winkel α_1 (durchgezogene Linie) ist in beiden Punkten o und $\mathbf{r}$ ungleich null. Bezüglich der Geraden l_2 mit Winkel α_2 (gestrichelte Linie) ist dagegen der Wert von f in $\mathbf{r}$ null ($\mathbf{r}$ liegt nicht in der Trägermenge). Das Integrationsgebiet in Formel (2.45) ist daher bezüglich α einzuschränken.	48
2.16	Kovarianzfunktion $k(r)$ des Geraden-Shot-Noise-Feldes mit Rechtecksfunktion (rot) und quadratischer Funktion (blau), wobei $L_A = 1$, $h = 4$ und $a = 2$	49
2.17	Kovarianz $C(r)$ der Niveaumenge $X_{e_n}(Z_M)$ des Poissonschen Geraden-Maximum-Feldes $\{Z_M(r, \varphi)\}$ mit a) quadratischer Funktion und b) Dreiecksfunktion, wobei $L_A = 1$, $a = 2$, $h = 4$, $e_n = 0, 5$	55
2.18	In dieser schematischen Darstellung hat die zufällige abgeschlossene Menge elliptische Poren. Die fett gedruckte Linie mit scharfen Zacken stellt den Wert der Booleschen Funktion $\{Z_n\}$ dar. Im Punkt r_1 ist $Z_n^*(r_1) = Z_n(r_1)$. Im Punkt r_2 trifft die Boolesche Funktion auf eine Pore. Somit ist $Z_n^*(r_2)$ die Summe aus Z_n und der Restsehnenlänge in vertikaler Richtung in der Pore (Wiegand und Stoyan, 2006b).	57
2.19	Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ mit $n = 6$, $h = 5$, $V_V = 0, 4$, $\lambda_2 = 0, 4$	59
2.20	Simulationen von Additiven Booleschen Modellen mit Kreisen. Rezentrierte und renormalisierte Überlagerungen von einer, zehn, 100, 1000 Simulationen eines Additiven Booleschen Modells mit Radius $r = 5/4$. Die Intensität beträgt links oben $\lambda = 16/(25\pi)$, rechts oben $\lambda = 160/(25\pi)$, links unten $\lambda = 1600/(25\pi)$ und rechts unten $\lambda = 16000/(25\pi)$ (Schlather, 1999).	61

3.1	Schematische Abbildung des vereinfachten Konditionierers mit dreieckigen Konditionierelementen (Wiegand und Stoyan, 2006b).	73
3.2	Das Profil eines dreieckigen Konditionierelementes ist gegeben durch den Öffnungswinkel α , die Tiefe h und die Breite $d_2 = 2a$. In einem ersten Schritt der Konditionierung (fett gedruckte Linie) liegt das Zentrum M_1 des Konditionierelementes in 0. Am Punkt r wird eine Schnitttiefe $V_1(r)$ erzeugt. In einem zweiten Schritt (gestrichelte Linie) könnte das Zentrum in den Punkt M_2 fallen. Dann beträgt die Tiefe in r gerade $V_2(r)$. Die Schnitttiefe Z_2 in r nach zwei Schritten ist das Maximum von $V_1(r)$ und $V_2(r)$. Im hier gezeichneten Fall ist $Z_2 = V_2(r)$ (Wiegand und Stoyan, 2006a).	74
3.3	Dichtefunktion der Oberflächentiefe eines Tuches ohne Poren nach $n = 6$ Zeitschritten, gegeben durch (3.3). Analog Borucki u. a. (2004) beträgt die Tiefe eines Konditionierelementes $h = 5 \mu\text{m}$ (Wiegand und Stoyan, 2006a).	76
3.4	Profil eines beliebigen Konditionierelementes mit Zentrum in 0. Die grauen Pfeile kennzeichnen die Menge aller Punkte r , in denen $V(r)$ kleiner bzw. gleich z_1 ist (Wiegand und Stoyan, 2006a).	76
3.5	In dieser schematischen Darstellung hat die zufällige abgeschlossene Menge elliptische Poren. Die fett gedruckte Linie mit scharfen Zacken stellt die Oberflächentiefe Z_n eines konditionierten Tuches ohne Poren dar. Im Punkt r_1 geschieht der Schnitt in der festen Phase des Tuches und somit ist $Z_n^*(r_1) = Z_n(r_1)$. Im Punkt r_2 trifft der Schnitt auf eine Pore. Somit ist die Oberflächentiefe $Z_n^*(r_2)$ die Summe aus der Tiefe des konditionierten Tuches ohne Poren und der Restsehnenlänge in vertikaler Richtung in der Pore (Wiegand und Stoyan, 2006a).	79
3.6	Dünnschliffaufnahme eines gebrauchten Porentuches mittels Rasterelektronenmikroskopie (Wiegand und Stoyan, 2006b).	81
3.7	Histogramm für die Sehnenlängen außerhalb der Poren, gemessen in Abb. 3.6 (Wiegand und Stoyan, 2006b).	82
3.8	Dichtefunktion $h_l(z) = g(z) = \lambda_2 \exp(-\lambda_2 z)$ der linearen Kontaktverteilung, multipliziert mit $(1 - V_V)$. Der Wert des Volumenanteils V_V wurde Daten von Letitia Malina, Motorola, entnommen und beträgt $V_V = 0.4$. Der Wert für den Parameter $\lambda_2 = 0.4$ wurde aus Abb. 11 in Borucki (2004) geschätzt: Der Wert $g(z)$ der Funktion in Abb. 11 für $z = 0$ ist ungefähr 0.24. Der Quotient aus 0.24 und $1 - V_V = 0.6$ ergibt λ_2 (Wiegand und Stoyan, 2006b).	82

3.9	Geschätzte Dichtefunktion für die Oberflächentiefe eines gebrauchten Fasertuches, mit Tastverfahren gemessen.	84
3.10	Geschätzte Dichtefunktion für die Oberflächentiefe eines gebrauchten Fasertuches, mit optischem Verfahren gemessen.	84
3.11	Histogramm der Oberflächentiefen eines gebrauchten Fasertuches (Wiegand und Stoyan, 2006b).	86
3.12	Geschätzte Dichtefunktion aus den Daten der Abb. 3.11 (Wiegand und Stoyan, 2006b).	86
3.13	Dichtefunktion $f_{Z_n^*}(z)$ für die Oberflächentiefe eines konditionierten Tuches, erhalten aus Formel (3.6). Die Parameter sind gleich zu denen in Abb. 3.3 und Abb. 3.8: $n = 6$, $h = 5$, $V_V = 0,4$, $\lambda_2 = 0,4$ (Wiegand und Stoyan, 2006b).	86
3.14	An Fasertüchern wurde die Porosität und die Härte vermessen. Mit steigender Porosität nimmt die Härte des Tuches ab.	87
3.15	Tuchprobe A: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	90
3.16	Tuchprobe B: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	91
3.17	Tuchprobe C: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	92
3.18	Tuchprobe D: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	93
3.19	Tuchprobe E: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	94
3.20	Tuchprobe F: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	95
3.21	Tuchprobe G: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	96

3.22	Tuchprobe H: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	97
3.23	Tuchprobe I: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	98
3.24	Tuchprobe J: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	99
3.25	Tuchprobe K: a) zweidimensionale Aufnahme (Lichtmikroskopie), b) dreidimensionale Aufnahme (konfokale Lasertechnik), c) die aus den Daten geschätzte Dichte- und Verteilungsfunktion für die Oberflächentiefe. .	100
3.26	REM-Aufnahme der Oberfläche eines neuen Tuches (ähnlich Probe A). .	102
3.27	REM-Aufnahme der Oberfläche der Tuchprobe F.	102
3.28	REM-Aufnahme der Oberfläche der Tuchprobe H.	102
3.29	Neuer Modellansatz in dieser Arbeit für die Kontaktfläche (grau) zwischen Wafer und Tuch: das Komplement eines Booleschen Modells. Einzelne Porenflächen sind Kreisflächen und die Kontaktfläche ist das Komplement der Porenflächen.	110
3.30	In der Literatur zu findendes Modell für die Kontaktfläche (grau) zwischen Wafer und Tuch: das Boolesche Modell. Das Tuch wird als Ebene mit „runden Buckeln“ modelliert. Wird der Wafer nun auf das Tuch gedrückt, ergibt sich als Kontaktfläche eine Vereinigung von Kreisflächen. .	110
3.31	Ein Teil der Partikel im Slurry wird durch den Druck in die Tucherhöhungen eingedrückt (schwarze Kreise). Diese Partikel bewirken den Materialabtrag. Der restliche Teil der Partikel bewegt sich weiterhin frei im Slurry (weiße und graue Kreise). Bei der freien Bewegung kann es gelegentlich zur Berührung der Waferoberfläche kommen (graue Kreise). Durch diese Berührung wird vernachlässigbar wenig Material abgetragen. Da davon ausgegangen wird, dass nur große Partikel Abtrag bewirken, sind auch nur diese dargestellt.	114
3.32	Der Abtrag wird mechanisch durch Mikrofurchen in der Waferoberfläche erzeugt. Das Zentrum einer Mikrofurche ist in der Abbildung durch eine blaue, teilweise gestrichelte Linie dargestellt. Für die Modellierung wird angenommen, dass die Zentren der Mikrofurchen näherungsweise Geraden sind.	115

- 3.33 Seitenansicht: Ein ebener Wafer in Kontakt mit einer rauen Tuchoberfläche (Ausschnitt). Der Abstand zwischen Wafer und mittlerer Tuche-ebene (gestrichelte Linie) wird mit d_{WT} bezeichnet, die Oberflächenhöhe des Tuches am Ort $\mathbf{x}$ mit z . Eine Tucherhöhung, die höher als d_{WT} ist, erzeugt eine Kontaktfläche zwischen Wafer und Tuch. Das Zentrum dieser Kontaktfläche wird mit $\mathbf{x}_j$ bezeichnet. In obiger Abbildung gibt es drei Kontaktflächen mit den Zentren $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$ und $\mathbf{x}_3$. Die Größe der einzelnen Kontaktflächen ist abhängig von den Materialeigenschaften und der betrachteten Verformung. Der Durchmesser der Kontaktfläche ist hier rot eingezeichnet. Draufsicht: Die drei dargestellten Kontaktflächen $\mathbf{x}_1 + \Xi_1$, $\mathbf{x}_2 + \Xi_2$, $\mathbf{x}_3 + \Xi_3$ sind von oben betrachtet Kreise mit unterschiedlichen Radien. Ihre Vereinigung ergibt die Kontaktfläche A für den hier gezeigten Ausschnitt. 118
- 3.34 Zweidimensionale Abbildung zur Veranschaulichung der Theorien für das Eindringen von Partikeln ins Tuch. Der Wafer wird belastet und bewegt sich entlang des Pfeils bis zur gestrichelten Linie. Nach dem Ansatz von Zhao und Chang (2002) entspricht der Anzahl der eingedrückten Partikel die Anzahl der Partikel, die auf einer horizontalen Schnittebene durch das Slurry liegen (Strich-Punkt-Linie); in der dargestellten Skizze 3 Partikel (schwarze Kreise). Jeng und Huang (2005) nehmen an, dass zusätzlich die über der Tucherhöhung befindlichen Partikel ins Tuch eingedrückt werden. In der dargestellten Skizze sind dies zusätzlich die weißen Kreise, d. h. $3+9=12$ eingedrückte Partikel. Luo und Dornfeld (2001) nehmen an, dass die Partikel, die durch die deformierten Tucherhöhungen (mit Höhe d_{WT}) verdrängt wurden, sich in der Tuchoberfläche einlagern (15 schraffierte Kreise). 125
- 3.35 Partikel-Wafer-Kontakt: Luo und Dornfeld (2001) gehen von plastischer Verformung zwischen Partikel und Wafer bzw. Partikel und Tuch aus. Es existiert ein Zwischenraum g zwischen Tuch und Wafer. Die Kontaktradien B_1 zwischen Partikel und Wafer bzw. B_2 zwischen Partikel und Tuch sind verschieden. Es gilt: Zwischenraum plus Eindringtiefe des Partikels in den Wafer plus Eindringtiefe des Partikels ins Tuch ist gleich Durchmesser des Partikels: $g + V + W = D$ 131

3.36	Wafer-Partikel-Tuch-Kontakt: Zhao und Chang (2002) nehmen plastische Verformung beim Kontakt des Partikels und des Wafers an. Der Kontakt zwischen Partikel und Tuch ist durch elastische Verformung gekennzeichnet. Das Partikel ist weit ins Tuch eingedrückt. Es gilt: Eindringtiefe des Partikels in den Wafer plus Eindringtiefe des Partikels ins Tuch ist gleich Durchmesser des Partikels: $W + V = D$	131
3.37	Zur Beleuchtung der Kräfte an der Kontaktstelle zwischen Partikel und Wafer erfolgt eine Beschränkung auf den $\mathbb{R}^2$ (Draufsicht). Links: Luo und Dornfeld (2001) nehmen gleitenden Einschnitt („sliding indentation“) als plastische Verformung an. Beim gleitenden Einschnitt wirkt die Kraft nur auf die vordere Hälfte des Kontaktkreises (grün), da beim hinteren Halbkreis das Material bereits abgetragen wurde. Rechts: In Zhao und Chang (2002) wird dagegen angenommen, dass die Kraft auf den kompletten Kontaktkreis wirkt.	132
3.38	Partikel im Slurry (Transmissions-Elektronen-Mikroskopie).	143
3.39	Verteilung der Durchmesser der Slurry-Partikel (Transmissions-Elektronen-Mikroskopie).	144
3.40	Verteilung der Durchmesser der Slurry-Partikel (Scheibenzentrifuge). . .	145
3.41	AFM-Aufnahmen polierter, kupferbeschichteter Siliziumoberflächen, $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$ (Lai, 2001).	146
3.42	AFM-Aufnahmen polierter, kupferbeschichteter Siliziumoberflächen (Jung und Singh, 2004).	147
3.43	AFM-Aufnahme der Waferprobe a.	149
3.44	Interferometrische Aufnahme der Waferprobe b.	150
3.45	Interferometrische Aufnahme der Waferprobe c. Die grünen Punkte kennzeichnen lokale Flächen, in denen ein Höhenunterschied von $> 11 \text{ nm}$ auf einem Quadrat von $2 \text{ mm} \times 2 \text{ mm}$ zu verzeichnen ist. Die größeren sehr dunklen Flächen sind langwelliger Natur und stammen von Vorprozessen — sie werden hier nicht betrachtet.	150
3.46	Zusammenhang zwischen Unebenheit der polierten Waferoberfläche (Varianz von $Z_t^H(x)$) und der Tuchrauheit ($\tau \cdot \bar{A}$, wobei τ die mittlere Anzahl der Poren pro Flächeneinheit des Tuches und $\bar{A}$ die mittlere Größe einer Pore ist). Als Proportionalitätsfaktor wurde 0,5 gewählt.	153
5.1	Simulation der Partikelbahnen auf der Waferoberfläche (Tso u. a., 2001).	ii

5.2	Histogramm der gemessenen Winkel bei zwei sich schneidenden Bahnen. Als Stichprobe wurde der Winkel an 16 Schnittpunkten gemessen. Der Wertebereich für den Winkel $(0, \pi]$ wurde in acht gleich große Klassen aufgeteilt. Jede Klasse hat annähernd die gleiche Anzahl von Winkeln, nämlich zwei, womit nichts gegen die Hypothese einer Gleichverteilung einzuwenden ist.	iii
-----	--	-----

Literaturverzeichnis

- [1] Baddeley, A. und Jensen, E. B. V. (2005): *Stereology for Statisticians*. Chapman and Hall/CRC, Boca Raton.
- [2] Bajaj, R. (1994): Effect of polishing pad material properties on chemical mechanical polishing (CMP) processes. *Materials Research Society Symposium Proceedings* **337**, 637-644.
- [3] Ballani, F., Stoyan, D. und Wolf, S. (2007): On two damage accumulation models and their size effects. *Applied Probability Trust* **44** (1), im Druck.
- [4] Binnig, G., Quate, C. F. und Gerber, C. (1986): Atomic force microscope. *Physical Review Letters* **56**, 930-933.
- [5] Borucki, L. J., Witelski, T., Please, C., Kramer, P. R. und Schwendeman, D. (2004): A theory of pad conditioning for chemical-mechanical polishing. *Journal of Engineering Mathematics* **50**, 1-24.
- [6] Borucki, L. J. (2002): Mathematical modeling of polishing rate decay in chemical-mechanical polishing. *Journal of Engineering Mathematics* **43**, 105-114.
- [7] Daley, D. J. und Vere-Jones, D. (2007): *An introduction to the Theory of Point Processes*. Bd. 2. Springer, New York.
- [8] DIN 53505 (August 2000): *Härteprüfung nach Shore A und Shore D*.
- [9] DIN EN ISO 4287 (Oktober 1998): *Geometrische Produktspezifikationen (GPS) — Oberflächenbeschaffenheit: Tastschnittverfahren — Benennungen, Definitionen und Kenngrößen der Oberflächenbeschaffenheit*.
- [10] Greenwood, J. A. und Williamson, J. B. P. (1966): Contact of nominally flat surfaces. *Proceedings of the Royal Society of London A* **295** **1442**, 300-319.

- [11] Greivenkamp, J. E. und Bruning, J. H. (1992): Phase Shifting Interferometers, in: D. Malacara (ed): *Optical Shop Testing*. Wiley, New York, 501-598.
- [12] Hooper, B. J., Byrne, G. und Galligan, S. (2002): Pad conditioning in chemical mechanical polishing. *Journal of Materials Processing Technology* **123**, 107-113.
- [13] Ihler, R. K. (1979): *The chemistry of Silica: Solubility, Polymerization, Colloid and Surface Properties and Biochemistry*. John Wiley and Sons, Chichester.
- [14] Jeng, Y. R. und Tsai, H. J. (2003): Improved model of wafer/pad powder slurry for CMP. *Journal of the Electrochemical Society* **150** (6), 348-354.
- [15] Jeng, Y. R. und Huang, P. Y. (2005): A material removal rate model considering interfacial micro-contact wear behaviour for chemical mechanical polishing. *Journal of Tribology-Transactions of the ASME* **127**, 190-197.
- [16] Jeulin, D. (1979): Thèse de Docteur-Ingénieur. Ecole des Mines de Paris.
- [17] Jeulin, D. u. Jeulin, P. (1981): Synthesis of Rough Surfaces by Random Morphological Models, *Stereologia Iugoslavica* **3**, Suppl. 1, 239-246.
- [18] Jeulin, D. (1991): *Modèles morphologiques de structures aléatoires et de changement d'échelle*. Thèse de doctorat d'Etat ès sciences physiques, Université de Caen.
- [19] Johnson, K. L. (1985): *Contact mechanics*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [20] Jung, S.-H. und Singh, R. (2004): Effect of Nano-Size Silica Abrasives in Chemical Mechanical Polishing of Copper, in: Boning, D. S., Bartha, J. W., Phillipossian, A., Shinn, G. und Voss, I. (eds.): *Advances in Chemical-mechanical polishing* **816**, 49-52.
- [21] Lai, J.-Y. (2001): *Mechanics, mechanisms, and modeling of the chemical mechanical polishing process*. Dissertation, Massachusetts Institute of Technology.
- [22] Laidlaw, I. und Steinmetz, M. (2005): Introduction to Differential Sedimentation, in: Scott, D. J. , Harding, S. E. und Rowe, A. J. (eds): *Analytical Ultracentrifugation. Techniques and Methods*. The Royal Society of Chemistry.
- [23] Lantuéjoul, C. (2002): *Geostatistical simulation*. Springer, Berlin.
- [24] Luo, J. und Dornfeld, D. A. (2001): Material removal mechanism in chemical mechanical polishing. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing* **14** (2), 112-133.

- [25] Maas, M. (2005): LEXT — Konfokales Laserscanningmikroskop für die Oberflächenanalytik, in: *Inspect. Bildverarbeitung, Oberfläche, Mikroskopie*. Sonderpublikation von Messtec und Automation. Ausgabe 1.
- [26] Magonov, S. N., Whangbo, M.-H. (1996): *Surface Analysis with STM and AFM*. VCH, Weinheim.
- [27] Matheron, G. (1975): *Random Sets and Integral Geometry*. John Wiley and Sons, New York.
- [28] Nanz, G. und Camilletti, L. E. (1995): Modeling of chemical-mechanical polishing: A review. *IEEE Transactions on Semiconductor Manufacturing* **8** (4), 382-389.
- [29] McCool, J. I. (1986): Comparison of models for the contact of rough surfaces. *Wear* **107**, 37-60.
- [30] Ohser, J. und Mücklich, F. (2000): *Statistical Analysis of Microstructures in Materials Science. Statistics in Practice*. John Wiley and Sons, Chichester.
- [31] Preston, F. W. (1927): The theory and Design of Plate Glass Polishing Machines. *Journal of the Society of Glass Technology* **11**, 214.
- [32] Ramírez, J. und Rider, B. (2003): *Stochastic Models for chemical-mechanical Polishing*. <http://math.colorado.edu/~brider/sandpap.pdf>.
- [33] Reimer, L. (1989): *Transmission electron microscopy*. Springer, Berlin.
- [34] Reimer, L. und Pfefferkorn, G. (1977): *Raster-Elektronenmikroskopie*. Springer, Berlin.
- [35] Rurländer, R. (2005): *Präsentation zu Silizium-Politur*. Siltronic AG.
- [36] Samuels, L. E. (2003): *Metallographic Polishing by Mechanical Methods*. ASM International, Ohio.
- [37] Schlather M. (1999): *Introduction to positive definite functions and to unconditional simulation of Random Fields*. Technical report ST-99-10. Lancaster University.
- [38] Schmidt, V. (1985): Poisson Bounds for Moments of Shot Noise Processes. *Statistics* **16**, 253-262.
- [39] Schnell, W., Gross, D., Hauger, W. (2002): Technische Mechanik 2 (Elastostatik). Springer, Berlin.

- [40] Serra, J. (1982): *Image analysis and mathematical morphology*. Bd. 1. Academic Press, London.
- [41] Serra, J. (1987): Boolean random functions, *Acta Stereologica* **6**, 325-330.
- [42] Serra, J. (1989): Boolean random functions. *Journal of Microscopy* **156** (1), 41-63.
- [43] Steigerwald, J. M., Murarka, S. P., Gutmann, R. J. (1997): *Chemical Mechanical Planarization of Microelectronic Materials*. John Wiley and Sons, Chichester.
- [44] Stoyan, D. (1993): *Stochastik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*. Akademie-Verlag, Berlin.
- [45] Stoyan, D., Kendall, W. S. und Mecke, J. (1995): *Stochastic Geometry and its Applications*. John Wiley and Sons, Chichester.
- [46] Stoyan, D. und Mecke, J. (1983): *Stochastische Geometrie*, Wissenschaftliche Taschenbücher, Bd. 275. Akademie-Verlag, Berlin.
- [47] Sundararajan, S., Thakurta, D. G., Schwendeman, D. W., Murarka, S. P. und Gill, W. N. (1999): Two-dimensional wafer-scale chemical mechanical planarization models based on lubrication theory and mass transport. *Journal of the Electrochemical Society* **146** (2), 761-766.
- [48] Thakurta, D. G., Borst, C. L., Schwendeman, D. W., Gutmann, R. J. und Gill, W. N. (2001): Three-dimensional chemical mechanical planarization slurry flow model based on lubrication theory. *Journal of the Electrochemical Society* **148** (4), 207-214.
- [49] Tichy, J., Levert, J. A., Shan, A. und Danyluk, S. (1999): Contact mechanics and lubrication hydrodynamics of chemical mechanical polishing. *Journal of the Electrochemical Society* **146**, 1523-1528.
- [50] Thomas, T. R. (1999): *Rough surfaces*. Imperial College press, London.
- [51] Torquato, S. (2002): *Random Heterogeneous Materials*. Springer, New York.
- [52] Tso, P.-L., Wang, Y.-Y. und Tsai M.-J. (2001): A study of carrier motion on a dual-face CMP machine. *Journal of Materials Processing Technology* **116**, 194-200.
- [53] Vlassek, J. J. (2004): A model for chemical-mechanical polishing of a material surface based on contact mechanics. *Journal of mechanics and physics of solids* **52** (4), 847-873.

- [54] Wenski, G., Altmann, T., Winkler, W., Heier, G. und Hölker, G. (2003): Doubleside polishing — a technology mandatory for 300 mm wafer manufacturing. *Materials Science in Semiconductor processing* **5**, 375-380.
- [55] Wiegand, S. (2003): Statistische Analysen zur Bruchfestigkeit von Porenbeton und Halbleiterwerkstoffen — Weibull-Theorie und Geostatistik. Diplomarbeit, TU Bergakademie Freiberg.
- [56] Wiegand, S. und Stoyan, D. (2006a): Stochastische Modelle für das chemo-mechanische Polieren, *Freiberger Forschungsheft B 337*. TU Bergakademie Freiberg.
- [57] Wiegand, S. und Stoyan, D. (2006b): Stochastic models for pad structure and pad conditioning used in chemical-mechanical polishing. *Journal of Engineering Mathematics* **54**, 333-343.
- [58] Wolf, S., Wiegand, S., Stoyan, D. und Walther, H. B. (2005): The Compressive Strength of AAC — a Statistical Investigation, in: Limbachiya, M. C. und Roberts, J. J. (eds): *Autoclaved Aerated Concrete*. Taylor and Francis Group, London.
- [59] Yu, T. K., Yu, C. C. und Orlowski, M. (1993): A statistical polishing pad model for chemical-mechanical polishing. *IEEE International Electron Devices Meeting, Washington DC, Dec. 5-8*, 865-868.
- [60] Zhao, Y. und Chang, L. (2002): A micro-contact and wear model for chemical mechanical polishing of Silicon Wafers. *Wear* **252**, 220-226.
- [61] Zhuang, Y., Borucki, L., Zhuang, R., Lacy, M., Spiro, C. und Philipossian, A. (2006): *Effect of conditioning force on pad topography and removal rate during Copper CMP*. Poster on International Conference on Planarization/CMP Technology, October 12-13, 2006, Foster City, CA.