

Inhaltsverzeichnis

AbbildungsverzeichnisVI

Tabellenverzeichnis.....XIII

Anhangsverzeichnis..... XV

1 Einleitung 1

 1.1 Motivation..... 1

 1.2 Stand der Forschung..... 2

 1.2.1 Aufbau einer kristallinen Silizium-Solarzelle 2

 1.2.2 Nasschemische Reinigungsverfahren bei der Herstellung kristalliner
 Silizium-Solarzellen..... 5

 1.2.3 Nasschemische Prozessanlagen..... 8

 1.2.4 Prozesssimulation der nasschemischen Prozessbecken 9

 1.2.5 Validierungsmethoden für Prozesssimulationen nasschemischer
 Prozessbecken 11

2 Zielsetzung und Strategie 13

 2.1 Ausgangssituation..... 13

 2.2 Zielsetzung und Strategie 15

3 Grundlagen 18

 3.1 Simulationsumgebung..... 18

 3.1.1 Allgemein 18

 3.1.2 Modellierung von Einphasenströmungen..... 19

 3.1.3 Schergeschwindigkeit einer Strömung..... 25

 3.1.4 Modellierung von Stofftransport und chemischen Reaktionen..... 26

 3.1.5 Modellierung von bewegten Netzen..... 27

 3.1.6 Lösungsmethoden, Studientypen und Löser 28

 3.1.7 Netz, Vereinfachungen und Qualitätssicherung..... 31

 3.2 Validierung und eingesetzte Geräte..... 35

 3.2.1 Prozessanlagen 35

 3.2.2 Farbversuche und Strömungsvisualisierung..... 36

3.2.3	Partikel Tracking Velocimetry (PTV).....	37
3.2.4	Charakterisierung des Verweilzeitverhaltens	39
3.2.5	UV/Vis-Spektroskopie.....	41
3.2.6	Titration	42
3.2.7	Ozon Messsonde.....	44
3.2.8	Oberfläche.....	44
4	Modellentwicklung und Methoden	47
4.1	Fluiddynamik des 2D-Beckens	48
4.1.1	Bilanzraum.....	48
4.1.2	Modellierung unterschiedlicher Strömungsformen	50
4.1.3	Parametervariationen zur Untersuchung der Auswirkungen unterschiedlicher Komponentenänderungen.....	51
4.2	Fluiddynamik der Einströmröhre.....	54
4.2.1	Bilanzraum.....	54
4.2.2	Untersuchung und Vergleich der Strömung einzelner Einströmröhre	56
4.3	Fluiddynamik des 3D-Beckens	57
4.3.1	Bilanzraum.....	57
4.3.2	Untersuchung der Beckenströmung ohne Einbauten.....	58
4.3.3	Validierung	59
4.4	Fluiddynamik im Prozessbecken mit Carrier	63
4.4.1	Bilanzraum.....	63
4.4.2	Untersuchung der Strömung im Becken mit Carrier	64
4.4.3	Validierung	65
4.5	Reaktionsmodellierung am Wafer.....	68
4.5.1	Bilanzraum Pyramiden	69
4.5.2	Abrundung der Pyramiden.....	70
4.5.3	Bilanzraum 2D-Waferkante	73
4.5.4	Erweiterung auf das 2D-Waferkantenmodell.....	74
4.5.5	Experimentelle Versuche zum Vergleich einer glatten mit einer texturierten Oberfläche	80

4.5.6	Experimentelle Versuche zur Erfassung von Referenzdaten	81
4.6	Reaktionsmodellierung des 3D-Teilmodells	81
4.6.1	Bilanzraum des 3D-Teilmodells ohne Wasserfilm	81
4.6.2	Bilanzraum des 3D-Teilmodells mit Wasserfilm	82
4.6.3	Validierung	84
5	Ergebnisse und Diskussion	86
5.1	Fluiddynamik des 2D-Beckens	86
5.1.1	Modellierung unterschiedlicher Turbulenzmodelle	86
5.1.2	Parameterstudie 1	88
5.1.3	Parameterstudie 2	90
5.1.4	Parameterstudie 3	92
5.2	Fluiddynamik der Einströmröhre	93
5.2.1	Vergleich	94
5.2.2	Gleichrichtung der Ausströmung	95
5.3	Fluiddynamik des 3D-Beckens	97
5.3.1	Qualitative Validierung: Farbversuche	97
5.3.2	Quantitative Validierung: Verweilzeitverteilung	102
5.4	Fluiddynamik im Prozessbecken mit Carrier	105
5.4.1	Vergleich Scherrate	105
5.5	Zwischenfazit fluiddynamische Modellierung	111
5.6	Reaktionsmodellierung – Abrundung der Pyramiden	113
5.7	Reaktionsmodellierung – Erweiterung auf Waferkante	115
5.7.1	Experimentelle Versuche zur Erfassung von Referenzdaten	115
5.7.2	Homogenität des Ätzprozesses	118
5.7.3	Erweiterung des Strömungsraums	120
5.7.4	Vorfaktor für die Ozondiffusion	121
5.7.5	Modellvereinfachung auf glatte Oberfläche	122
5.7.6	Modellerweiterung: gesamte Waferkantenlänge, HF-Reaktion und Parameter der aktuellen Ätzanlage	123

5.7.7	Wahl von initialen Geschwindigkeitskonstanten.....	124
5.7.8	Bestimmung der Konstanten in Parameterstudien	127
5.8	Reaktionsmodellierung des 3D-Teilmodells	129
5.8.1	Validierung Strömung PTV	129
5.8.2	Übertrag 2D auf 3D	133
5.8.3	Mit und ohne H ₂ O-Film	135
5.9	Zwischenfazit Reaktionsmodellierung	139
6	Abschließende Bewertung.....	143
6.1	Experimenteller und simulativer Aufwand.....	143
6.2	Abschätzung der Abweichung Experiment und Simulation	145
7	Zusammenfassung und Ausblick	152
A	Anhang	XVI
A1	Modellmaße und Netzkonvergenzstudien	XVI
i)	2D-Becken.....	XVI
ii)	Einströmröhre	XVIII
iii)	Becken 3D	XXI
iv)	3D-Carrier.....	XXIV
v)	2D-3-Pyramidenmodell.....	XXVI
vi)	2D-Waferkantenmodell.....	XXVIII
vii)	Teilmodell 3D ohne Wasserfilm.....	XXX
viii)	Teilmodell 3D mit Wasserfilm	XXXI
A2	Statistische Grundlagen	XXXIII
A3	Reynoldszahlen	XXXIV
A4	Fluiddynamik des 2D-Beckens.....	XXXV
A5	Fluiddynamik der Einströmröhre	XXXVII
A6	Quantitative Validierung – Verweilzeitverteilung.....	XXXVII
A7	Schichtwiderstands- und ECV-Messung	XXXVIII
A8	PTV Ergebnisse	XL
A9	Reaktionsmodellierung	XLI

i)	Zeitschrittweite	XLI
ii)	Rundungsradius.....	XLI
iii)	Ozondiffusion	XLII
Symbolverzeichnis		XLIV
Literaturverzeichnis.....		XLIX
Studentische Arbeiten.....		LIX
Liste der Publikationen		LX
Danksagung		LXI