

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	6
Tabellenverzeichnis	8
Abkürzungsverzeichnis	9
1 Einleitung	11
2 Theoretische Grundlagen	14
2.1 Vielteilchentheorie	14
2.1.1 Die Vielteilchen-Schrödingergleichung	15
2.1.2 Adiabatische Näherung	15
2.1.3 Elektronische Schrödingergleichung	16
2.2 Kinetik chemischer Reaktionen	22
2.2.1 Reaktionsgeschwindigkeit	22
2.2.2 Übergangszustandstheorie nach Arrhenius und Eyring . . .	22
2.2.3 Zustandssummen	23
2.2.4 Ab initio Berechnung von minimalen Energiepfaden und Übergangszuständen	25
2.3 ReaxFF - ein reaktives Kraftfeld	28
3 Modellierung von Low-k- und Ultra-low-k-Materialien	36
3.1 Einleitung	36
3.2 Simulationsdetails	38
3.3 Methyloxyiertes Siliziumdioxid als Modellsystem für ULK-Materialien	38
3.4 Erzeugung amorpher ULK-Materialien	40
3.5 Amorphes Volumen-ULK-Material	42
3.6 Modell einer amorphen ULK-Oberfläche und einer ULK-Pore . . .	43
4 Reinigung geschädigter Ultra-low-k-Materialien	45
4.1 Ablösen von CF-Polymerfilmen mit Flusssäure	46

4.1.1	Reaktionsmechanismen	48
4.1.2	Einfluss von Wasser	49
4.1.3	Beurteilung von Flusssäure als Reiniger	50
4.2	Aminhaltige Reiniger	51
4.2.1	Methylamin	51
5	Reparatur geschädigter Ultra-low-k-Materialien	58
5.1	Vorauswahl der Reperaturchemikalien	61
5.2	Charakterisierung und Geometrieoptimierung der Reparaturchemikalien	62
5.2.1	Hexamethyldisilazan	62
5.2.2	N-(trimethylsilyl)imidazol	63
5.2.3	Bis(dimethylamino)dimethylsilan, Bis(diethylamino)dimethylsilan und Dimethyldiacetoxysilan	64
5.2.4	Octamethylcyclotetrasiloxan	65
5.2.5	Hexamethylcyclotrisilazan	67
5.3	Silylierungsreaktion von Hexamethyldisilazan an verschiedenen ULK-Materialien	67
5.3.1	Reaktionsenergien	67
5.4	Silylierung von siliziumgebundenen Hydroxylgruppen	69
5.4.1	Minimale Energiereaktionspfade	70
5.4.2	Reaktionsprozess	74
5.4.3	Vor- und Nachreaktionskomplexe	74
5.4.4	Übergangszustände	81
5.5	Thermische Korrekturen und Reaktionsraten	85
5.6	Silylierung geminaler Hydroxylgruppen	87
5.7	Kondensationsreaktion mit Octamethylcyclotetrasiloxan	89
5.8	Abstands- und Größenproblem	89
5.9	Anti-Reparatur	92
5.10	Kombinierte Anwendung von Reparaturchemikalien	94
5.11	Reinigungs- und Reparaturschema - Prozessempfehlung	95
6	Diffusion in ULK-Materialien	97
6.1	ReaxFF zur Beschreibung von Diffusionsprozessen	99
6.2	Wahl der ReaxFF-Parameter	99
6.3	Training des ReaxFF-Parametersatzes	103
6.3.1	Erzeugung eines Trainingssatzes aus ab initio Berechnungen	104

Inhaltsverzeichnis

6.3.2	Automatisierungsalgorithmus	104
6.4	Reduktion der Parameterzahl	106
6.5	Berechnung der Selbstdiffusionskonstante verschiedener Organosilikate	108
7	Zusammenfassung	110
	Danksagungen	115
	Literaturverzeichnis	116
	Selbständigkeitserklärung gemäß Promotionsordnung §6(2)4	123