

DISSERTATION

**Dreidimensionale Finite Elemente
Simulation von
Verdrahtungsstrukturen auf
Integrierten Schaltungen**

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der technischen Wissenschaften

eingereicht an der Technischen Universität Wien
Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik
von

Rainer SABELKA



Wien, im Februar 2001

Kurzfassung

Durch die fortschreitende Miniaturisierung integrierter Schaltkreise wird der Einfluss der Verbindungsstrukturen auf das Schaltungsverhalten immer gravierender. Je höher die Schaltgeschwindigkeit der Transistoren wird und je dünner die Verbindungsleitungen werden, umso mehr treten ihre parasitären Eigenschaften in den Vordergrund und werden zu einem begrenzenden Faktor für weitere Geschwindigkeitssteigerungen dieser Schaltungen. Mit Taktfrequenzen im GHz-Bereich verhalten sich integrierte Schaltkreise immer mehr wie Mikrowellenschaltungen. Hauptsächlich ihr elektrischer Widerstand und Kapazitäten verursachen störende Eigenschaften wie Signalverzögerungen, Dämpfung, Übersprechen, und Erwärmung. Bis zu einem gewissen Grad lassen sich Verbesserungen durch die Verwendung alternativer Materialien erzielen. So wird z.B. Kupfer anstatt Aluminium verwendet, um die Leitfähigkeit zu erhöhen und es wird mit verschiedenen anorganischen und organischen Dielektrika experimentiert, die eine geringere Dielektrizitätszahl als SiO_2 aufweisen.

Ganz vermeiden lassen werden sich diese parasitären Materialeffekte allerdings nicht. Deshalb ist es unumgänglich durch geeignete Entwurfmaßnahmen diese Effekte zu berücksichtigen, um Fehlfunktionen zu verhindern. Dabei stellt die Computersimulation ein ganz wesentliches Hilfsmittel dar. Je genauer die Simulationen durchgeführt werden, desto näher kann man an die physikalischen Grenzen gehen, um die Leistungsfähigkeit einer integrierten Schaltung weiter zu steigern.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden nun Simulationswerkzeuge entwickelt, um parasitäre Effekte wie Leitungswiderstände und Kapazitäten, transientes Signalverhalten und thermische Reaktionen mit hoher Genauigkeit und trotzdem mit bestmöglicher Effizienz (im Hinblick auf CPU-Zeit und Speicherbedarf) zu berechnen. Gegenüber anderen (kommerziellen) Programmpaketen hat der in dieser Arbeit vorgestellte Simulator den Vorteil, die Berechnungen mit anisotropen Dielektrika sowie gekoppelten elektro-thermischen Simulationen mit temperaturabhängigen Materialeigenschaften durchführen zu können. Als numerisches Verfahren wird die Finite Elemente Methode verwendet. Ihr wurde aufgrund der Anwendbarkeit auf alle hier vorkommenden Differentialgleichungstypen sowie ihrer großen numerischen Robustheit der Vorzug gegenüber anderen Verfahren gegeben. Bei der zeitlichen Diskretisierung sind sowohl das Rückwärts-Euler-Verfahren als auch die Trapezmethode (Crank-Nicolson) implementiert. Für die örtliche Diskretisierung der Differentialgleichungen wird das Galerkin-Verfahren angewendet. Dabei erhält man ein lineares Gleichungssystem sehr hoher Ordnung, das in einem komprimiertem Format abgespeichert wird, um eine effiziente Nutzung des Rechner Hauptspeichers zu gewährleisten. Dieses Gleichungssystem wird mit einem vorkonditionierendem Conjugate-Gradient-Solver (ICCG) gelöst. Da die vorkommenden partiellen Differentialgleichungen schwache Nichtlinearitäten aufweisen, wird eine einfache Relaxationstechnik angewendet, um die Lösung zu ermitteln.

Für eine genaue Simulation ist es unerlässlich, das Simulationsgebiet geometrisch möglichst

exakt zu modellieren. Dazu werden die einzelnen geometrischen Teilstücke als polygonal begrenzte Körper dargestellt (*Boundary Representation*). Außerdem ist Konsistenz im Sinne von Punkt-, Linien- und Flächenkonformität, sowie Überlappungsfreiheit gefordert. Da aufgrund dieser Konsistenzforderungen eine händische Geometrieerstellung unmöglich erscheint, wird ein Präprozessor entwickelt, der einen schichtweisen Geometrieaufbau nach dem *solid modeling*-Prinzip ermöglicht und automatisch für Konsistenz sorgt.

Die Genauigkeit der Lösung steht und fällt mit der Qualität des Simulationsgitters. Der schichtweise Geometrieaufbau lässt sich für eine besonders einfache und robuste Gittererzeugungsmethode nutzen. Vor- und Nachteile werden anhand eines Vergleiches mit anderen Gittermethoden diskutiert.

Die Simulatoren berechnen nicht nur globale Größen wie etwa Widerstände und Kapazitäten, oft ist man auch an verteilten Größen wie Potenzial, Temperatur oder Stromdichte interessiert. Mit einem dafür entwickelten Visualisierungsprogramm lassen sich diese Attribute auf der Oberfläche anzeigen, Isoflächen und Schnittbilder darstellen sowie Feldlinien berechnen.

Abschließend soll anhand verschiedener praktischer Anwendungen die Leistungsfähigkeit des Simulators demonstriert werden. Es wird eine elektro-thermische Simulation einer Teststruktur mit Al-Leitern durchgeführt und die Ergebnisse werden mit Messwerten verglichen. Das elektrische und thermische Verhalten einer Leitungseinengung, die etwa durch Elektromigration entstehen kann, wird detailliert untersucht. Der Widerstand von Vias in *Cu dual damascene* Architektur wird berechnet und Verzögerungszeiten und Übersprechen in einem Poly-Silizium Widerstandspaar werden mittels transients Simulation ermittelt.

Abstract

Down-scaling of integrated circuits to the deep sub-micron regime increases the influence of interconnects on circuit behavior. As devices are getting faster and line widths get smaller parasitic effects of the interconnects become the limiting factor for further improvements in circuit speed. With clock frequencies in the GHz regime, integrated circuits will behave more and more like microwave circuits.

During the design phase care must be taken on various parasitic effects, like attenuation caused by resistive voltage drops, self-heating due to losses, delay times, crosstalk (caused by capacitive or inductive coupling or by the substrate), reflections incurred by discontinuities, skin-effect and eddy currents (e.g. in on-chip spiral inductors). While it is important to consider the inductive effects of very long interconnects with low resistance and of course on-chip inductors, the electrical characteristics of local interconnects lines is mainly determined by their resistance and capacitance. With the introduction of new materials (Copper, low-k dielectrics) parasitic effects can be reduced to a certain degree, but not eliminated. Therefore highly accurate models are required especially for designs with reduced safety margins close to the physical limits.

In this thesis a set of simulation tools for highly accurate extraction of parasitic capacitances and resistances, simulation of transient electric behavior, and investigation of the thermal characteristics has been developed. Special attention has been directed to an efficient implementation considering both runtime and memory consumption. Compared to other (commercial) tools the simulator presented in this work has the ability to perform calculations with anisotropic dielectric materials and coupled electro-thermal simulations with temperature-dependent material properties. The finite element method (FEM) is used for the numeric solution of the partial differential equations. This method has been selected over other methods because of its numerical robustness and the applicability to all involved equation types. For the discretization of the time domain both the backward Euler and the trapezoid method (Crank-Nicolson) have been implemented. The spatial discretization is carried out with the Galerkin method. The discretization results in a linear system of equations which is stored in a compressed sparse matrix format for efficient usage of main memory. The equation system is solved with a preconditioned conjugate gradient solver (ICCG). Some of the involved partial differential equations exhibit a slight non-linear behavior. For that reason a simple relaxation technique is used to find the solution.

For highly accurate simulations it is essential to model the simulation domain geometrically as exact as possible. Therefor the *boundary representation* is used, where solids are formed by their polygonal hull. Adjacent solids must not overlap and must have conformal faces, lines, and points. Because of these consistency requirements a manual geometry construction is nearly impossible. For this reason a preprocessor has been developed, which allows a layer-based geometry construction and enforces the required consistency with a solid modeling technique.

The accuracy and efficiency of a finite element simulation depends strongly on the quality of the simulation grid. The layered structure of the geometry can be utilized for a simple but robust grid generation method. Pros and cons of this method will be discussed by a comparison with other gridding techniques.

The simulators extract not only global parameters like resistances and capacitances, also distributed quantities like potential, temperature, or current density are calculated. To display these three-dimensional scalar and vector fields a visualization program has been developed, which allows for the representation of the quantity on the surface, generation of contour lines and faces, cuts, and the calculation of streamlines.

Finally four application examples are presented to demonstrate the capabilities of the simulation tools. An electro-thermal simulation is performed for an Al-line test structure and the results are compared with experimentally measured values. The electrical and thermal behavior of an interconnect line with a notch (e.g. caused by electromigration) is investigated in detail. The resistance of vias in a *Cu dual damascene* architecture is calculated, and delay times and cross-talk in a matched poly-resistor pair are computed with a transient simulation run.

Danksagung

Mein Dank gilt all denen, die mich während meiner Zeit am Institut für Mikroelektronik positiv beeinflusst haben. Ohne die Unterstützung meiner Kollegen und Freunde wäre das Zustandekommen dieser Arbeit nicht in dieser Form möglich gewesen. Vor allem möchte ich mich bei Prof. Dr. Siegfried Selberherr bedanken. Durch seine hervorragende Betreuung, die ausgezeichnete Ausstattung am Institut, seine guten industriellen Kontakte, sein Talent mich mit der richtigen Dosis an Druck und dennoch ausreichendem Entfaltungsfreiraum zu motivieren, sowie durch das angenehme Arbeitsklima ist das Gelingen dieser Arbeit erst möglich geworden.

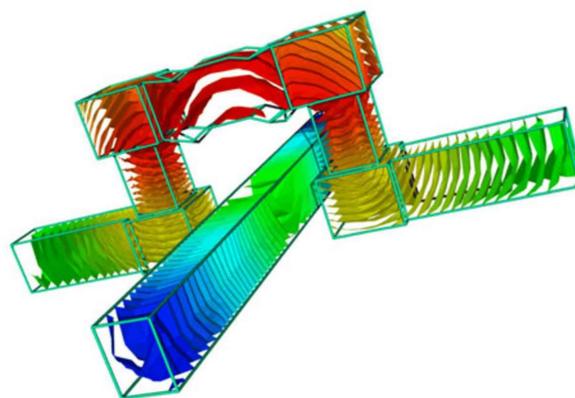
Besonders danken möchte ich ebenfalls meinem Zweitbetreuer Prof. Dr. Herbert Haas vom Institut für Grundlagen und Theorie der Elektrotechnik, der mit seiner fachliche Kompetenz und Erfahrung im Gebiet der Finiten Elemente Simulation mir dabei half alle Unklarheiten im theoretischen Teil dieser Arbeit zu bereinigen.

Robert Bauer hat mit seiner Dissertation und seinen Simulationsprogrammen zur Kapazitätsextraktion den Grundstein für meine Arbeit gelegt und hatte für meine Fragen immer ein offenes Ohr. Mein Kollege Robert Kosik stand mir bei mathematischen Problemen immer mit guten Tipps beiseite und hat sich damit großes Lob verdient. Speziell möchte ich mich bei meinen Zimmerkollegen Helmut Puchner, Ernst Leitner, Heinrich Kirchauer, Rui Martins, Andreas Stach, Wolfgang Pyka, Andreas Hössinger, Christian Harlander und Johann Cervenka bedanken, die nicht nur für die angenehme Arbeitsatmosphäre verantwortlich waren, sondern auch jederzeit hilfsbereit waren, wenn es darum ging fachliche Diskussionen zu führen, das Computernetzwerk zu testen oder ab und zu ein Bier zu trinken. Mein Dank ergeht auch an meinen Kollegen Peter Fleischmann, der es oftmals als einziger schaffte, meinen schlecht erzählen Witzen und Wortspielen durch seine Heiterkeit trotzdem etwas an Humor abzugewinnen.

Weiters möchte ich mich noch bei Sabine Gundacker bedanken, die mir bei der neuen deutschen Rechtschreibung auf die Sprünge geholfen hat. Mein Lob gilt auch Hannes Rohrböck, der über die Jahre für mein leibliches Wohl gesorgt hat.

Großen Dank verdienen auch meine Eltern und Verwandten für ihre Unterstützung während meines gesamten Studiums.

Den größten Dank möchte ich meiner Freundin Gabi Gundacker aussprechen, die mich umorgt und mit ihrer Liebe verwöhnt hat.



Isothermenflächen zweier stromdurchflossener Leiter

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Aufbau integrierter Schaltungen	1
1.2	Technologie	3
1.3	Verbindungsstrukturen als begrenzende Faktoren	5
1.3.1	Leitungswiderstand und Erwärmung	5
1.3.2	Kapazität, Verzögerung und Übersprechen	6
1.3.3	Induktivität	6
1.3.4	Elektromigration	7
1.4	Strategien und Trends	8
1.4.1	Materialien	8
1.4.2	Entwurf	9
1.5	ECAD und TCAD	10
1.6	Modellierungstechniken für Verbindungsstrukturen	11
2	Grundlagen	15
2.1	Kapazität	15
2.2	Leitungswiderstand	19
2.3	Elektro-quasistatische Analyse	21
2.4	Wärmeleitung	22
3	Numerische Feldberechnung	25
3.1	Finite Differenzen	25
3.2	Finite Elemente	26
3.3	Boundary Element Methode	27
3.4	Hybride Methoden	28
3.5	Stochastische Methoden	29
3.6	Zusammenfassung der Feldberechnungsmethoden	30
4	Diskretisierung mit Finiten Elementen	33
4.1	Grundlagen	33
4.2	Das Verfahren von Ritz	34
4.3	Methode der gewichteten Residuen	36
4.4	Elementformulierung	39
4.5	Assemblerung	46
4.6	Lösung des Gleichungssystems	53
4.7	Nichtlineare Probleme	56

5	Geometrische Modellierung und Gittererzeugung	59
5.1	Geometrie Repräsentationen	59
5.2	Punktsuche	64
5.3	Geometrische Operationen und Modellierung	67
5.4	Erzeugung des Simulationsgitters	70
6	Dreidimensionale Visualisierung	77
6.1	Oberflächendarstellung	78
6.2	Isoflächendarstellung	79
6.3	Volumsdarstellung	81
6.4	Schnittbilder	82
6.5	Vektorfelder	82
6.6	Gitter	85
7	Anwendungen	87
7.1	Thermische Simulation von Aluminium-Leitern	87
7.2	Auswirkung einer Leitungseinengung	90
7.3	Widerstandsberechnung von Vias in Cu-DD Architektur	97
7.4	Transiente Simulation eines Polysilizium-Widerstandes	99
8	Ausblick	105
A	Die „Smart Analysis Programs“	107
	Lebenslauf	125

Kapitel 1

Einleitung

Es gibt kaum einen anderen Bereich der Elektrotechnik, in dem die Entwicklung so rasant fortschreitet, wie in der Mikroelektronik. Durch extreme Miniaturisierung gelingt es, immer mehr Transistoren auf einem Chip unterzubringen und ihre Schaltgeschwindigkeit zu erhöhen. Gleichzeitig wird der Querschnitt der Verbindungsleitungen reduziert und ihre Gesamtlänge steigt dramatisch an, damit erhöht sich ihr Widerstand und die Kapazität zu anderen Leitungen bzw. zum Substrat. Parasitäre Eigenschaften wie z.B. Verzögerungszeiten, machen die Verbindungsstrukturen zu begrenzenden Faktoren für eine weitere Steigerung der Leistungsfähigkeit integrierter Schaltungen.

Eine wesentliche Rolle beim Entwurf integrierter Schaltungen spielen Computerunterstützung und Simulation. Da man immer näher an die physikalischen Grenzen der Materialeigenschaften geht, werden für den Schaltungsentwurf die zulässigen Toleranzen immer geringer. Hochgenaue Computersimulationen werden notwendig, um aufwendige und kostspielige Experimente zu vermeiden.

Im Rahmen dieser Arbeit werden Methoden zur stationären und transienten Modellierung des elektrischen und thermischen Verhaltens des Verbindungsnetzwerkes, sowie zur Extraktion diskreter elektrischer Parameter vorgestellt. Dazu wurde ein Programmpaket mit Simulationswerkzeugen entwickelt, in welchem die beschriebenen Methoden implementiert wurden. Als numerisches Verfahren wird die Finite Elemente Methode (FEM) verwendet, wobei auf die Vorarbeit in [1] zurückgegriffen wird. Andere gängige Verfahren werden in Kapitel 3 kurz vorgestellt und verglichen. Weitere Themen sind die geometrische Modellierung und Erzeugung des Simulationsgitters, sowie Verfahren zur dreidimensionalen grafischen Darstellung von Simulationsergebnissen. Den letzten Teil bildet die Analyse einer Reihe von praktischen Anwendungsbeispielen mit Hilfe der entwickelten Simulationsprogramme.

Vorerst wird ein Überblick vom Aufbau integrierter Schaltungen und den Herstellungsprozessen gegeben. Der Schwerpunkt liegt dabei natürlich bei den sogenannten *back-end* Prozessen, die zur Herstellung der Verbindungsstrukturen dienen.

1.1 Aufbau integrierter Schaltungen

Abbildung 1.1 zeigt einen Querschnitt durch einen typischen CMOS Chip. Vom Silizium-Substrat mit einer Gesamtdicke von etwa $500\ \mu\text{m}$ ist lediglich die oberste Schicht dargestellt. Auf der Oberfläche des Siliziums kann man einen NMOS und einen PMOS Transistor erkennen.

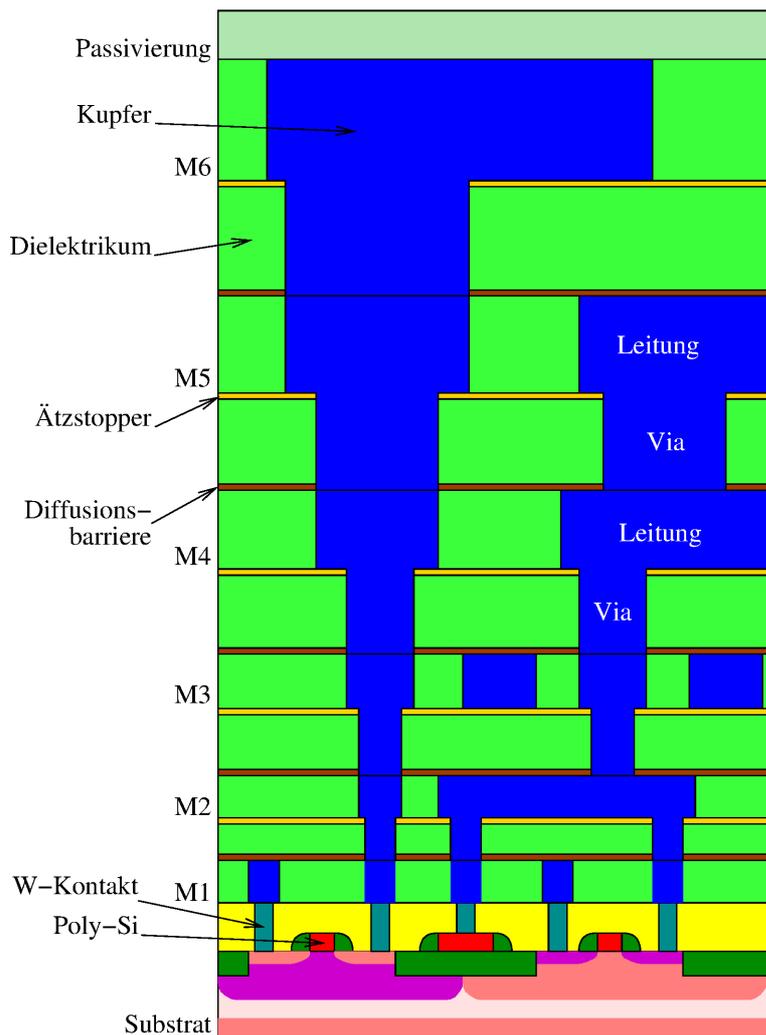


Abbildung 1.1: Vereinfachter Querschnitt durch einen typischen CMOS Chip in *Cu Dual-Damascene* Architektur mit sechs Metallisierungsebenen (M1–M6)

Die Gate-Anschlüsse werden aus polykristallinem Silizium gebildet. Kontakte aus Wolfram dienen als elektrische Verbindung von den Diffusionsgebieten der Transistoren zu Leitungen in der ersten Metallisierungsebene (M1).

Die Höhe der Leitungen in den Ebenen M1 und M2 liegt im Bereich von 500 nm, ihre Breite ist etwas geringer¹. Als Leitermaterialien werden Aluminium oder Kupfer verwendet. Da der Querschnitt sehr klein ist, haben die Leitungen einen hohen Widerstand je Längeneinheit (100 Ω /mm und darüber). Gemeinsam mit Leitungen aus Poly-Silizium direkt über dem Substrat werden sie für kurze lokale Verbindungen genutzt. Für Leitungen über große und mittlere Distanzen werden die oberen Metallisierungsebenen in Anspruch genommen, die einen größeren Querschnitt haben und daher auch geringere Verluste aufweisen. Die Anzahl der Verbindungsstrukturschichten kann je nach Art der integrierten Schaltung unterschiedlich sein. Typischerweise werden in dynamischen Speichern 2–3 Lagen und in Mikroprozessoren 6–7 Schichten verwendet. Die Gesamtlänge aller Verbindungsleitungen kann in einem Chip bis über 1 km betragen.

Eine wichtige Rolle spielt auch das Dielektrikum, das den Raum zwischen den Leitungen

¹Die hier angegebenen Zahlen sind typische Werte für einen CMOS Prozess in 250 nm Technologie

füllt. Es soll eine möglichst geringe Dielektrizitätszahl aufweisen, um kapazitive Kopplungen zwischen den Leitern gering zu halten, muss aber auch gewisse mechanische und thermische Anforderungen erfüllen. Es wird dafür hauptsächlich SiO_2 verwendet ($\epsilon_r = 3.9$), inwieweit andere Materialien mit kleinerer Dielektrizitätszahl geeignet sind, wird zur Zeit experimentell untersucht (beispielsweise in [2]).

1.2 Technologie

Die Herstellung eines Integrierten Schaltkreises ist ein sehr aufwendiges Unterfangen. Es bedarf mehrerer hundert Prozessschritte, die nacheinander durchgeführt werden müssen. Die einzelnen Prozesse lassen sich in zwei große Gruppen einteilen, den *front-end*-Prozessen, die zur Herstellung der aktiven Schaltelemente auf der Oberfläche des Substrats dienen, und den *back-end*-Prozessen, welche die Verbindungsstrukturen erzeugen. Zu den front-end-Prozessen gehören hauptsächlich Ionenimplantation, Diffusion, Oxydation, back-end-Prozesse sind unter anderem Ätzen, Deponieren und Planarisieren. Daneben stehen die Lithografie-Prozesse, wie das Aufbringen von Fotolack, Belichten und Entwickeln, die in beiden Gruppen überall dort vorkommen, wo eine Struktur von einer Vorlage (Maske) auf den Chip übertragen werden muss. Im Folgenden soll lediglich auf die Prozesse zur Herstellung der Verbindungsstrukturen näher eingegangen werden.

Die einzelnen Metallisierungsebenen werden Lage für Lage aufgebaut. Zwei gängige Herstellungsverfahren sind in den beiden folgenden Abbildungen dargestellt.

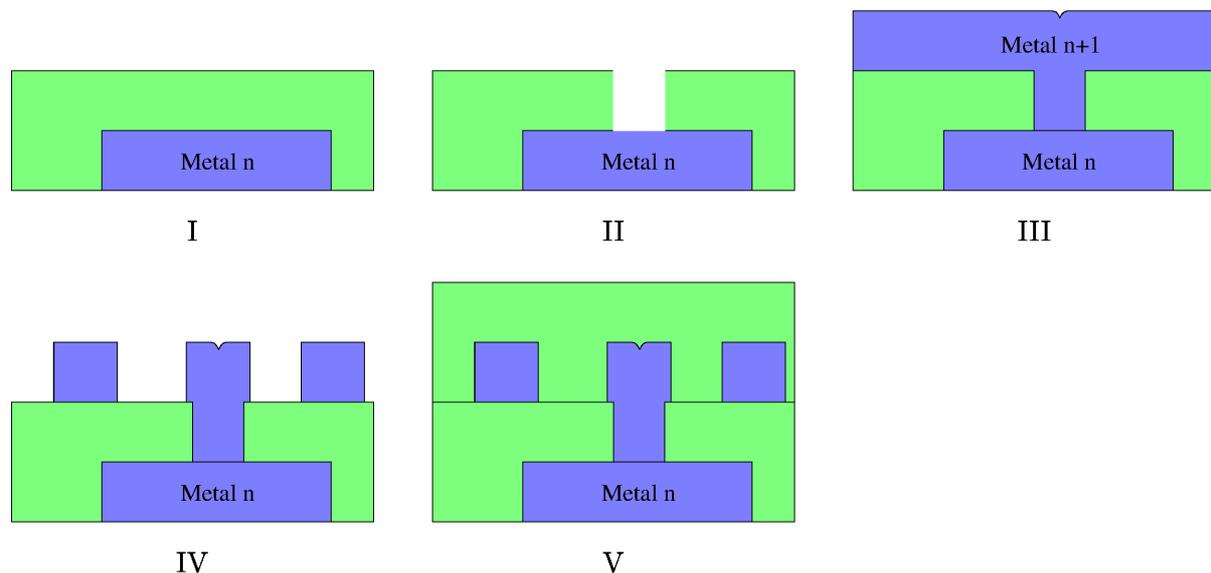


Abbildung 1.2: Herstellung einer Metallisierungsebene und Durchkontaktierungen in einem konventionellen Prozess

Abbildung 1.2 zeigt die wichtigsten Prozessschritte der konventionellen Methode. Für jede Metallisierungsschicht wird folgendermaßen vorgegangen: Zuerst wird ein Dielektrikum (SiO_2) auf die Metallverbindungen der vorigen Ebene aufgetragen (I). In diese Schicht werden Löcher geätzt, wo später Durchkontaktierungen (sogenannte *Vias*) zwischen der vorigen und der neuen Ebene entstehen sollen (II). Dabei handelt es sich in Wirklichkeit nicht nur um einen, sondern

gleich um eine Reihe von verschiedenen Prozessschritten: Zuerst wird eine Fotolackschicht aufgetragen, auf die dann eine Maske, die die Struktur der Durchkontaktierungen enthält, projiziert wird. Anschließend wird entwickelt, wobei der Fotolack an den belichteten Stellen aufgelöst wird. Dann erst kann das Ätzen erfolgen und zum Schluss wird der restliche Fotolack entfernt.

Als nächstes wird die Metallschicht deponiert und gleichzeitig werden die Vias gefüllt (III). Was in der Abbildung als eine einzige homogene Schicht dargestellt ist, besteht in der Praxis meist aus mehreren Lagen: Zuerst wird eine Schicht, meist aus Titan bzw. Titannitrid aufgebracht, die eine gute Haftung zum darunterliegenden SiO_2 gewährleistet und auch als Barriere gegen Diffusion und Elektromigration dient. Da diese Materialien einen sehr hohen spezifischen Widerstand haben, versucht man die Dicke so gering wie möglich zu halten (etwa 10–40 nm). Dann erst kommt der eigentliche Leiter, eine Schicht aus reinem Aluminium oder einer Legierung mit einigen Prozent Kupfer. Zu oberst kommt üblicherweise noch eine dünne Lage eines lichtabsorbierenden Materials (z.B. TiN), um störende Reflexionen bei nachfolgenden Lithografieschritten zu vermeiden.

Um aus der durchgehenden Metallschicht einzelne Leiter zu formen, wird in einem Lithografieschritt eine Maske aufgebracht, um die Zwischenräume zu ätzen (IV).

Dann wird eine dielektrische Schicht (SiO_2) aufgetragen, die die Isolation zur nächsten Ebene bildet (V). Dabei können auf der Oberfläche Unebenheiten auftreten, die sich für die nachfolgenden Prozessschritte als störend erweisen würden. Es kann deshalb noch notwendig sein, die Oberfläche durch chemisch-mechanisches Polieren (CMP) zu planarisieren.

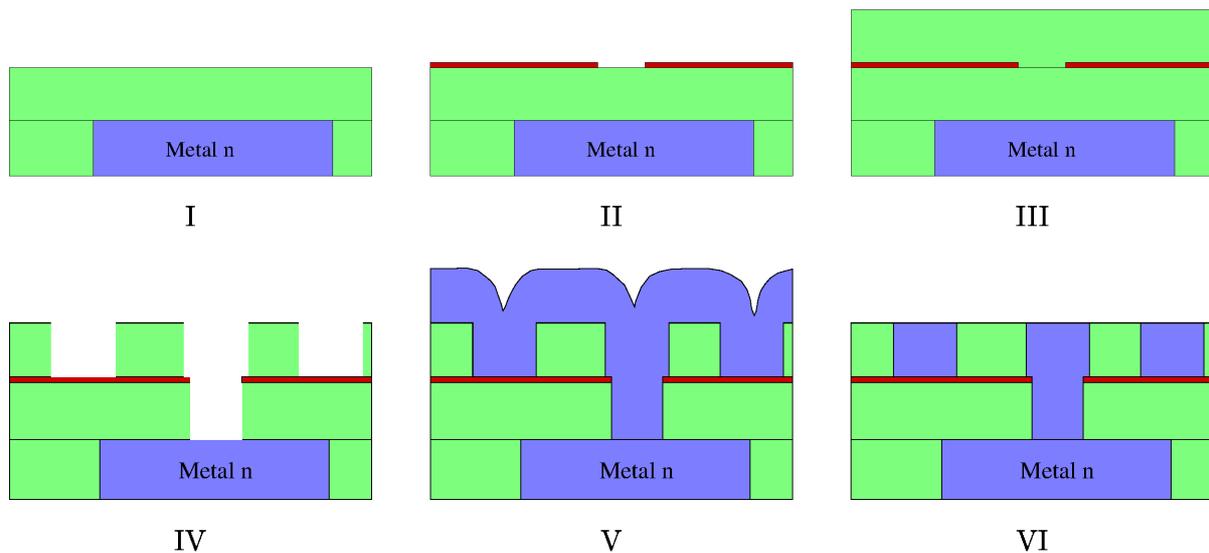


Abbildung 1.3: Herstellung einer Metallisierungsebene und Durchkontaktierungen in *Dual-Damascene* Architektur

In Abb. 1.3 wird eine Metallisierungsebene im sogenannten *Dual-Damascene* Verfahren hergestellt. Wie bei der konventionellen Methode, wird zuerst mit einer SiO_2 -Schicht zwecks Isolierung begonnen (I).

Dann wird eine dünne Si_3N_4 -Lage aufgetragen, in die an den Stellen, wo später Vias entstehen sollen, Löcher geätzt werden (II).

Es folgt eine weitere SiO_2 -Schicht (III), in die anschließend Wannan geätzt werden, wo Leitungen entstehen sollen (IV). Dabei handelt es sich um einen selektiven Ätzprozess—es wird ein

Ätzmittel verwendet, das nur das SiO_2 auflöst aber Si_3N_4 nicht angreift. Nur an Stellen, wo zuvor die Si_3N_4 -Schicht geöffnet wurde, wird bis zur darunter liegenden Metalllage durchgeätzt.

Anschließend wird das Metall für die nächste Lage deponiert, wobei Durchkontaktierungen und Leitungen gleichzeitig aufgefüllt werden (V). Die Metallschicht besteht wieder aus einer dünnen Diffusionsbarriere und dem eigentlichen Leitungsmetall.

Das überschüssige Metall wird anschließend durch chemisch-mechanisches Polieren (CMP) wieder entfernt (VI). Bevor nun wieder SiO_2 als Isolation zu nächsten Leiterschicht deponiert wird, bringt man noch eine dünne Schicht eines dielektrischen Materials auf, das als Diffusionsbarriere nach oben hin dient (nicht in der Abbildung dargestellt).

Der Dual-Damascene Prozess scheint aufwendiger zu sein als der konventionelle Prozess, hat aber zwei bedeutende Vorteile: Es entfällt das Ätzen vom Metall, und es ist möglich, das Metall rundherum mit einer Diffusionsbarriere "einzupacken". Diese beiden Eigenschaften machen die Dual-Damascene Architektur für Kupfer-Interconnects besonders geeignet, da einerseits das Cu-Ätzen prozesstechnisch sehr schwierig ist und andererseits Kupfer sehr gut in SiO_2 diffundiert und deshalb unbedingt von allen Seiten mit einer Diffusionsbarriere umgeben sein muss.

1.3 Verbindungsstrukturen als begrenzende Faktoren

Durch die anhaltende Miniaturisierung integrierter Schaltungen wird die Geschwindigkeit der Transistoren immer größer. Bei der Signallaufzeit auf den Verbindungsleitungen, die hauptsächlich durch ihre RC Zeitkonstante gegeben ist, lässt sich ein solcher Trend leider nicht in diesem Ausmaß beobachten [3] und ihre elektrischen Eigenschaften werden maßgebend für das Verhalten der Gesamtschaltung. Um die Leistungsfähigkeit integrierter Schaltungen weiter zu steigern, muss man deshalb besonders bei den Metallleitungen nach Lösungen zur Verringerung der parasitären Effekte suchen oder, falls das nicht möglich ist, zumindest ihr Verhalten mit hoher Genauigkeit simulieren, um Beeinträchtigungen der Funktion der Gesamtschaltung möglichst früh zu erkennen und durch entsprechende Maßnahmen im Schaltungsentwurf entgegen zu wirken. Doch nicht nur die elektrischen, sondern auch die thermischen und mechanischen Eigenschaften der Verbindungsstrukturen müssen beim Entwurf berücksichtigt werden.

Es treten dabei parasitäre Effekte auf, wie Dämpfung durch den Leitungswiderstand, Signalverzögerung, Übersprechen (kapazitiv, induktiv oder über das Substrat), Reflexionen durch Diskontinuitäten, Skin-Effekt, Wirbelströme, Verluste durch elektromagnetische Abstrahlung, Erwärmung durch elektrische Verlustleistung, Elektromigration und Stressmigration. Auf die wichtigsten Punkte wird in den folgenden Unterabschnitten näher eingegangen.

1.3.1 Leitungswiderstand und Erwärmung

Der elektrische Widerstand der Verbindungsleitungen bewirkt einen Spannungsabfall und somit eine Dämpfung des übertragenen Signals. Bei langen Leitungen muss man deshalb einen entsprechend großen Leitungsquerschnitt wählen und in regelmäßigen Abständen Verstärker (Repeater) einsetzen.

Durch die elektrische Verlustleistung entsteht Wärme, die durch das Oxid in Richtung Substrat oder Chip-Oberfläche abgeleitet wird. Dem überlagert sich noch der Temperaturanstieg durch die Abwärme der Transistoren. Leider ist SiO_2 kein besonders guter Wärmeleiter. Noch schlimmer ist es bei den meisten "low-k" Dielektrika, die eine noch schlechtere Wärmeleitfähigkeit als SiO_2 besitzen. Ein besonderes Problem stellt die Abwärme in der *Silicon On Insulator*

(SOI) Technologie dar, weil hier die Transistoren zur Gänze von einem schlecht wärmeleitendem Isolator umgeben sind [4].

MOS-Transistoren sind sehr empfindlich gegenüber elektrostatischen Entladungen (ESD), man verwendet deshalb spezielle ESD-Schutzschaltungen, um die hohen Stromimpulse abzuleiten. In den Metalleitungen kommt es dabei zu extrem hohen Stromdichten innerhalb kurzer Zeit (um die 100 ns) und damit zu lokaler Erwärmung bis hin zum Schmelzen der Leitung [5], was natürlich durch Gegenmaßnahmen im Entwurf verhindert werden muss.

1.3.2 Kapazität, Verzögerung und Übersprechen

Durch die Kapazität zwischen den verschiedenen Leitungen bzw. zwischen Leitungen und dem Substrat und dem Leitungswiderstand kommt es zu Signalverzögerungen. Die Verzögerungszeit ist in etwa dem Quadrat der Leitungslänge proportional (genauere Berechnung [6, 7]). Deshalb stellt sie ein besonderes Problem für globale Verbindungsleitungen dar, z.B. für Taktleitungen oder Busse zwischen Funktionseinheiten von Prozessoren. Abhilfe kann man durch das Einfügen von Repeatern in regelmäßigen Abständen erzielen, man muss dabei aber beachten, dass der Repeater selbst auch eine Signalverzögerung bewirkt.

Durch kapazitive Kopplung kommt es auch zu Übersprechen zwischen über längere Strecken benachbarten Leitungen. Auch Kopplungen über das Substrat können Übersprechen verursachen [8–10].

1.3.3 Induktivität

Induktive Effekte wurden lange Zeit beim Entwurf von ICs vernachlässigt. Das liegt einerseits daran, dass ihre Wirkung erst bei sehr hohen Frequenzen merkbar wird, andererseits sicher auch an der Tatsache, dass ihre Berechnung ungleich aufwendiger ist, als dies bei den Kapazitäten oder Widerständen der Fall ist. Für lokale Verbindungen und solche über mittlere Distanzen brauchen Induktivitäten nach wie vor nicht berücksichtigt werden, weil ihr Widerstandsbelag im Vergleich zum Induktivitätsbelag relativ hoch und ihre Länge im Vergleich zu den auftretenden Wellenlängen kurz ist. Bei sehr langen, niederohmigen bzw. auf minimale Verzögerung optimierten Leitungen wie z.B. Taktleitungen oder die Spannungsversorgung, muss man zunehmend die Selbstinduktivität berücksichtigen. Durch induktive Kopplungen kann auch Übersprechen entstehen, z.B. über die Versorgungsleitungen durch Stromspitzen, die vom Schalten der Transistoren herrühren. Während bei der Kapazität praktisch nur Leiter in der unmittelbaren Umgebung einen Einfluss haben, können bei den induktiven Kopplungen auch weiter entfernte Leiter beitragen.

Streng genommen ist die Induktivität nur für geschlossene Leiterschleifen definiert. Will man nun die Induktivität einer Leitung berechnen, so ist das Ergebnis nicht nur von der Leitungsgeometrie sondern auch vom Retourweg des Stromes abhängig, der oft nicht genau bekannt ist. Je näher Hin- und Rückweg des Stromes beisammen liegen, umso geringer wird die gesamte Induktivität sein. Oft nimmt man einen Retourweg über das Substrat an, berechnet dadurch aber einen zu großen Induktivitätswert, falls der Strom (bzw. ein Teilstrom) über andere (nähere) Verbindungsstrukturen zurückfließt. Die berechneten Werte sind jedoch durchaus brauchbar, wenn man lediglich an „worst case“-Abschätzungen interessiert ist. Verschiedene Ansätze zur Induktivitätsberechnung sind in [11–15] zu finden.

1.3.4 Elektromigration

Elektromigration ist ein gerichteter Diffusionsprozess, der durch Impulsübertragung der Leitungselektronen auf die Atomrümpfe des metallischen Leiters entsteht. Durch die immer höhere Belastung der Verbindungsleitungen mit Stromdichten von 0.1 MA/cm^2 und mehr, stellt die Verminderung der Zuverlässigkeit infolge von Materialabtragung durch Elektromigration ein großes Problem dar. Elektromigration ist kein Phänomen, das einen sofortigen Schaltungsausfall verursacht. Erst nach längerer Betriebszeit kann es sowohl zu Widerstandserhöhungen, zu vollständigen Unterbrechungen, als auch zu Kurzschlüssen benachbarter Leiter infolge von Materialansammlungen kommen. Abbildung 1.4 zeigt eine SEM-Aufnahme von einer durch Elektromigration entstandenen Unterbrechung (a) und einer Metallansammlung (b) auf einem experimentellen Testchip.

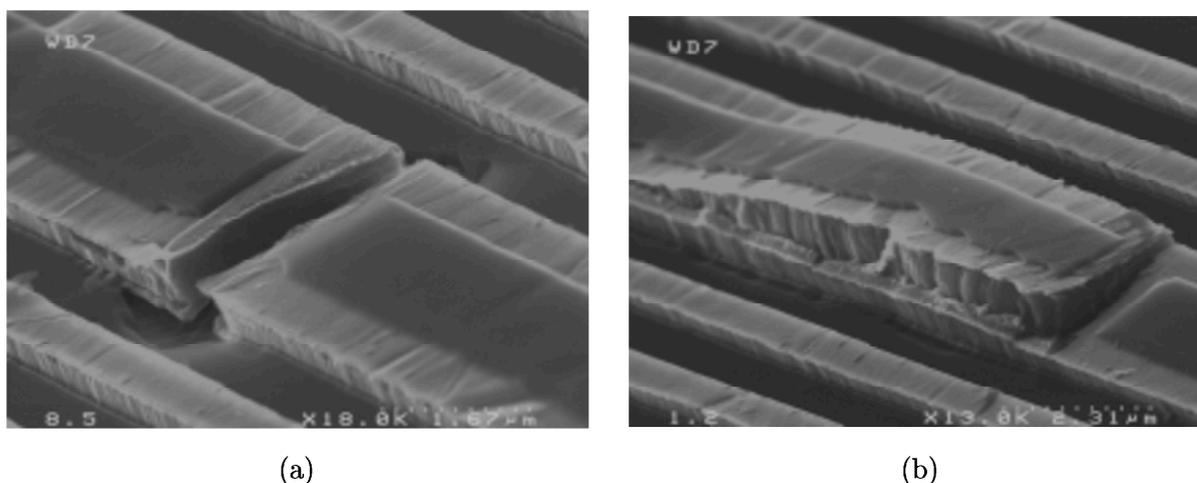


Abbildung 1.4: Durch Elektromigration entstandene Unterbrechung (a) und Materialansammlung (b) auf einem Testchip (P. Walz et al. [16])

Die treibende Kraft für die Diffusion der Metallatome ist die Stromdichte. Erhöhte Temperatur führt zu einer deutlichen Beschleunigung des Diffusionsvorganges. Eine analytische Beschreibung der mittleren Ausfallzeiten als Funktion von Stromdichte und Temperatur ist durch die Black'sche Gleichung gegeben [17]. Elektromigration hängt aber noch von vielen anderen Faktoren ab wie z.B. von der Struktur der Korngrenzen, von mechanischen Spannungen [18], sowie der Länge und dem Querschnitt der Leitung [19] und lässt sich deshalb nur mit sehr aufwendigen Modellen genauer charakterisieren [20]. Die Diffusionsvorgänge finden bevorzugt entlang der Korngrenzen statt. Eine Leitung mit einem Querschnitt, der klein gegenüber der mittleren Korngröße ist, hat somit eine höhere Elektromigrationsfestigkeit, da fast alle Korngrenzen annähernd parallel zur Querschnittsfläche liegen (Bambus-Struktur). Natürlich spielt auch die Art des verwendeten Metalls eine Rolle. Kupfer hat beispielsweise eine um einen Faktor 100 höhere Elektromigrationsfestigkeit als reines Aluminium². Die Elektromigrationsfestigkeit von Al lässt sich aber steigern, indem man es mit wenigen Prozent Cu legiert. Cu lagert sich bevorzugt an den Korngrenzen an und „verstopft“ somit die wichtigsten Diffusionswege [21, 22].

²Das bedeutet aber nicht, dass eine 100fache Stromdichte erlaubt ist, da sich die Elektromigrationsfestigkeit auf die Lebensdauer bezieht.

1.4 Strategien und Trends

Durch die erwähnten parasitären Effekte wird die Leistungsfähigkeit der Verbindungsstrukturen dramatisch eingeschränkt. Für eine Verbesserung dieser Situation gibt es nun drei Ansatzpunkte [23,24], nämlich

- die Verwendung neuer *Materialien*, wie Metalle mit höherer Leitfähigkeit und Isolatoren mit geringerer Dielektrizitätszahl,
- verbesserte *Entwurfstrategien*, sowie
- genaue *Simulationen*, die eine Schaltungsverifikation ermöglichen, bevor noch der erste Chip gefertigt wurde.

1.4.1 Materialien

Die Verwendung von Cu anstelle von Al bewirkt eine Reduktion des Widerstandes um etwa 40% [25]. Da Kupfer unbedingt mit einer Diffusionsbarriere umgeben sein muss, die im Allgemeinen eine sehr schlechte Leitfähigkeit besitzt, geht dieser Vorteil bei sehr dünnen Leitungen wieder verloren (Abb. 1.5). Auch der Widerstand von Vias wird durch die Barriere wesentlich erhöht.

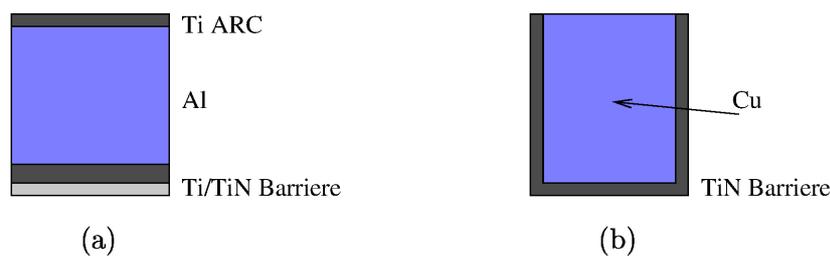


Abbildung 1.5: Querschnitt durch eine Verbindungsleitung in Standard-Al (a) und Dual-Damascene-Cu Architektur (b)

Alternativ zu metallischen Barrierschichten können dielektrische Materialien verwendet werden, um die Cu-Diffusion zu unterdrücken. Leitungs- und Via-Widerstände können damit deutlich reduziert werden [26].

Um die kapazitive Last der Verbindungsleitungen zu verringern, sucht man Materialien mit niedriger Dielektrizitätszahl (*low-k*), die statt dem SiO_2 verwendet werden können [27,28]. Aber außer den erwähnten elektrischen Eigenschaften müssen diese Materialien auch mechanische und thermische Stabilität besitzen, ausreichend gute Wärmeleiter sein, genügend Adhäsion zu darüber- und darunterliegenden Schichten haben, sollen möglichst mit den gängigen Prozessmethoden verarbeitbar sein und sollten im Betrieb stabil und zuverlässig sein.

Neue Materialien liefern einen wesentlichen Beitrag, um die Leistungsfähigkeit der Verbindungsstrukturen zu erhöhen. Man nimmt aber an, dass hier maximal ein Faktor 6 in der Verbesserung der Verzögerungszeit erreicht werden kann, da man die Dielektrizitätszahl etwa um einen Faktor 3 und den spezifischen Widerstand der Leitungen maximal um einen Faktor 2 senken wird können³.

³Es ist nicht damit zu rechnen, dass supraleitende Materialien in näherer Zukunft für den Bereich der Mikroelektronik zur Verfügung stehen werden.

1.4.2 Entwurf

Beim Entwurf der Verbindungsleitungen wurde bisher hauptsächlich auf minimale Chipfläche optimiert. Mit dem zunehmenden Einfluss der Verbindungsleitungen auf das Schaltungsverhalten muss nun zusätzlich auf folgende Einschränkungen Rücksicht genommen werden [29]:

- Die maximale Verzögerungszeit darf nicht überschritten werden [30].
- Das Übersprechen muss unter einem bestimmten Pegel bleiben [31].
- Die maximale Stromdichte darf nicht überschritten werden (Elektromigration).

Nach diesen Kriterien wird festgelegt, in welcher Ebene die Leitung angesiedelt wird, wie die Leitungsführung angelegt werden soll, wie breit die Leitung wird, welcher Mindestabstand zu anderen Leitungen eingehalten werden muss, bzw. ob diese Anforderungen überhaupt mit einer durchgehenden Leitung erfüllt werden können oder ob Repeater eingefügt werden müssen [32–36]. Die Leitungen müssen dabei in jedem Schritt des Entwurfsprozesses berücksichtigt werden, da beispielsweise die Länge einer Leitung direkt von der Platzierung der Bauelemente abhängt, oder die Größe eines Treibers über dessen Impedanz in die Verzögerungszeit eingeht.

Kapazitives Übersprechen zwischen benachbarten Leitungen in einer Ebene oder übereinander liegender Leitungen aus verschiedenen Ebenen lässt sich durch das Einführen von Masseflächen reduzieren. Da bei Leitungen mit hohem Dicke/Breite-Verhältnis (high aspect ratio) die Kopplungskapazität hauptsächlich durch die Seitenflächen bestimmt wird, ist es in solchen Fällen günstiger, anstelle von Masseflächen Schirmleitungen auf Massepotenzial zwischen den Signalleitungen zu platzieren (Abb. 1.6). Die Maßnahmen zur Abschirmung bewirken auch eine Verringerung der Induktivität, weil dadurch der Abstand zwischen Hin- und Rückweg des Stromes reduziert wird.



Abbildung 1.6: Durch Abschirmung (grau) kann das Übersprechen zwischen Signalleitungen (blau) verringert werden. Die Abschirmung kann entweder durch Masseflächen (a) oder Schirmleitungen (b) erfolgen.

Ein anderes Beispiel zur Reduktion von Übersprechen durch Entwurfsmaßnahmen ist das versetzte Einfügen von Invertern insbesondere bei Busleitungen. Bei langen Leitungen ist es ohnehin notwendig in gewissen Abständen Inverter (bzw. Repeater) einzufügen, um Dämpfung, Laufzeit und Übersprechen gering zu halten. Versetzt man die Inverterstufen jeder zweiten Leitung um den halben Abstand zwischen den Stufen, so erreicht man damit, dass einander sowohl kapazitive als auch induktive Kopplungen zwischen zwei benachbarten Leitungen kompensieren (siehe Abb. 1.7). Auch die Selbstinduktivität einer Leitung wird dadurch deutlich reduziert [15].

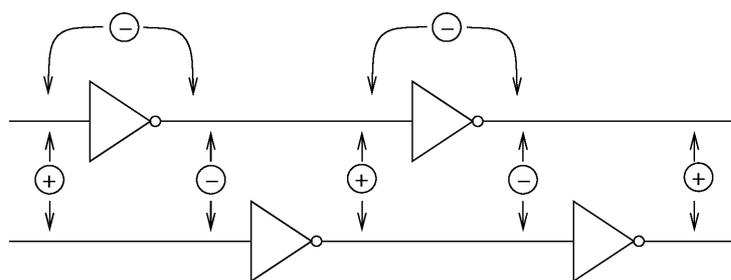


Abbildung 1.7: Durch das verteilte Einfügen von Invertern in Busleitungen wird sowohl kapazitives als auch induktives Übersprechen reduziert.

1.5 ECAD und TCAD

Unter ECAD (Electronic Computer-Aided Design) versteht man Systeme für den computerunterstützten Entwurf von integrierten Schaltungen. Als Ergebnis liefern diese Programme eine Beschreibung der physikalischen Struktur des Chips in Form von Fotomasken. Die Struktur der Masken wird nur selten manuell erstellt, meist erfolgt die Eingabe auf einer höheren Stufe, z.B. auf Transistor-Ebene oder in einer Hardware-Programmiersprache (*Hardware Description Language*). Die prozesstechnischen Grenzen der Fertigung werden in vereinfachter Form durch die sogenannten *Design Rules* widerspiegelt. Sie geben z.B. die minimale Leiterbreite, Abstände und die Größe der Vias an. ECAD-Systeme enthalten einen *Design-Rule-Checker*, mit dem die erzeugten Masken überprüft werden. Weiters können Schaltungssimulation auf Transistor-Ebene, Logik-Ebene oder Register-Ebene durchgeführt werden. Dabei werden für Transistoren analytische Modelle und für die Kapazitäten und Widerstände der Verbindungsstrukturen einfache geometrische Modelle verwendet. Diese Modelle sind fix für eine bestimmte Herstellungstechnologie konzipiert und müssen für jede neue Technologie speziell kalibriert werden.

Unter TCAD (Technology Computer Aided Design) versteht man die Simulation des physikalischen Herstellungsprozesses (wie z.B. Diffusion, Deposition, Ätzen, ...) auf Grundlage der Maskeninformation und der Prozessparameter mit numerischen Modellen. Anhand des resultierenden geometrischen Modells des Chips bzw. eines Teils davon können dann weitere physikalisch motivierte Simulationen durchgeführt werden. So kann man etwa das elektrische und thermische Verhalten von Transistoren und Verbindungsleitungen analysieren, indem man die Laplace-Gleichung, Halbleitergleichungen und Wärmeleitungsgleichung löst. Diese Analysen können durchgeführt werden, noch bevor der erste Testchip gefertigt wird, wodurch aufwendige Messverfahren eingespart werden können. Manche Größen lassen sich überhaupt nicht direkt messen (wie z.B. die Strom- und Temperaturverteilung in einem Via) und können ausschließlich durch Simulationen bestimmt werden. Damit lassen sich Kosten und Zeit für die Entwicklung neuer Technologien deutlich reduzieren.

Mit jeder neuen Halbleitergeneration steigt auch die Anforderung an die Genauigkeit der verwendeten Modelle und Simulationen, da die Toleranzreserven beim Entwurf immer kleiner werden und man den physikalischen Materialgrenzen immer näher kommt. Deshalb geht der Trend in Richtung Zusammenwachsen von ECAD- und TCAD-Tools. So können etwa in kritischen Bereichen, in denen die Anforderungen an die Genauigkeit mit einfachen Modellen nicht mehr erfüllt werden können, hoch genaue Methoden aus dem TCAD-Bereich zur Anwendung kommen. Aus Gründen der Effizienz (im Hinblick auf CPU-Zeit und Speicher) ist es aber unerlässlich, die Bereiche, die mit aufwendigen Methoden simuliert werden, möglichst klein zu halten. Es ist jedoch schwierig, die Entscheidung welche Modelle in welchen Bereichen zur An-

wendung kommen sollen, zu automatisieren, sowie zwischen den einzelnen Bereichen geeignete Schnittstellen zu finden [37–39].

1.6 Modellierungstechniken für Verbindungsstrukturen

Üblicherweise berücksichtigt man die elektrischen Eigenschaften der Verbindungsstrukturen, indem man globale Größen, wie Widerstände und Kapazitäten extrahiert und sie dann in die Schaltungssimulation mit einbezieht. Eine genaue Parameterextraktion bildet somit die Grundlage für aussagekräftige Simulationen, da das elektrische Verhalten in zunehmendem Maß von den Verbindungsleitungen bestimmt wird [40,41]. In der Literatur ist eine große Anzahl solcher Extraktionsmethoden zu finden—die nächsten Absätze sollen einen kurzen Überblick geben.

Kapazitätsextraktion

Es gibt verschiedene Ansätze Kapazitäten zu berechnen:

- analytisch,
- mit geometrischen Modellen, oder
- durch numerische Feldberechnungsmethoden, die auf der Lösung der Laplace-Gleichung beruhen.

Die analytische Feldberechnung ist leider nur für sehr einfache Geometrien (z.B. unendlich lange Leitung über ebenem Grund [42]) durchführbar.

Bei der Berechnung mit geometrischen Modellen versucht man die Kapazität direkt aus der Geometrie mittels empirischer Formeln abzuschätzen. So wird z.B. die Kapazität zweier benachbarter Leitungen aus einem Anteil, der proportional zur überlappenden Fläche ist, und einem Streuanteil zusammengesetzt. Vor allem in ECAD-Tools wird diese Methode bevorzugt verwendet, um direkt aus der Maskeninformation Kapazitäten zu extrahieren. Das Verfahren benötigt nur wenig CPU-Zeit, hat aber den Nachteil, dass es für sehr komplexe Strukturen mit vielen Metallisierungsebenen und Durchkontaktierungen ungenaue Ergebnisse liefert. Eine Reihe von mehr oder weniger aufwendigen Modellen ist in [43–54] beschrieben.

Die genauesten Ergebnisse bei allgemeinen dreidimensionalen Strukturen lassen sich erzielen, indem man die Laplace-Gleichung mit numerischen Feldberechnungsmethoden wie z.B. Finiten Elementen (FEM) oder der Boundary Element Methode (BEM) löst. Ihnen ist ein eigenes Kapitel gewidmet.

Widerstandsextraktion

Da die Berechnung von Leitungswiderständen ebenfalls auf der Lösung der Laplace-Gleichung basiert, sind die verwendeten Methoden ähnlich denen der Kapazitätsextraktion. Die Tatsache, dass ein Großteil der Verbindungsstruktur aus länglichen Quadrern besteht, für die der Widerstand sofort angegeben werden kann, hat den Vorteil, dass in vielen Fällen mittels einfacher geometrischer Methoden, Resultate mit zufriedenstellender Genauigkeit erreicht werden können. So kann etwa der Widerstand sehr einfach durch „Abzählen von Quadraten“ oder allgemeineren polygonalen Zerlegungen [55] näherungsweise berechnet werden. Komplexe Geometrien lassen sich jedoch nur mit numerischen Methoden (z.B. FEM) ausreichend genau berechnen.

Kopplungseffekte über das Substrat können eine wichtige Ursache für Fehlfunktionen sein, besonders bei gemischten Analog-Digitalschaltungen und sehr empfindlichen Schaltkreisen, wie etwa in DRAMs. Um diese Kopplungen berechnen zu können, muss auch für die parasitären Strompfade über das Substrat eine Widerstandsextraktion durchgeführt werden. Dazu kann man entweder das Substrat durch ein Netzwerk diskreter Widerstände annähern [56] oder die Berechnung mittels FEM oder BEM durchführen [57, 58].

Modellierung der Leitungsverzögerung

Für die Berechnung der Verzögerungszeit langer Leitungen ist es oft nicht ausreichend die Leitung als einfaches RC-Glied, basierend auf den extrahierten Widerständen und Kapazitäten, zu betrachten. Man kann nun entweder die Leitung in mehrere Teilstücke zerlegen und jedes dieser Teilstücke durch ein RC-Glied modellieren und somit die Ordnung des Modells erhöhen, oder man nimmt den Widerstand und die Kapazität gleichmäßig über die Leitung verteilt an und berechnet die Lösung mit der Telegraphengleichung [59, 60].

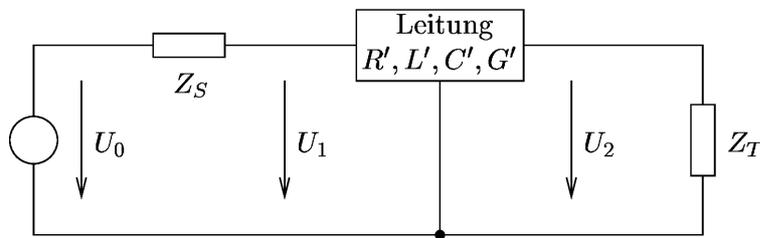


Abbildung 1.8: Modellierung von Leitungen mittels der Telegraphengleichung

Voraussetzung für die Gültigkeit der Telegraphengleichung ist, dass die Leitung in TEM oder Quasi-TEM Konfiguration betrieben wird, das bedeutet, dass das elektrische und magnetische Feld (annähernd) normal auf die Ausbreitungsrichtung stehen. Diese Bedingung ist auf den Verbindungsstrukturen mikroelektronischer Schaltungen in der Regel erfüllt. Aber auch wenn diese Voraussetzungen nicht ganz erfüllt sind, liefert die Telegraphengleichung noch gute Näherungen.

Für eine Anordnung gemäß Abb. 1.8 kann man die Telegraphengleichung im Frequenzbereich lösen und erhält folgende Übertragungsfunktion

$$H(s) = \frac{1}{\left(1 + \frac{Z_S}{Z_T}\right) \cosh(\Gamma l) + \left(\frac{Z_S}{Z_0} + \frac{Z_0}{Z_T}\right) \sinh(\Gamma l)} \quad (1.1)$$

mit der Leitungslänge l , der Ausbreitungskonstanten $\Gamma = \sqrt{(R' + sL')(G' + sC')}$ und dem Wellenwiderstand $Z_0 = \sqrt{(R' + sL')/(G' + sC')}$. R' , L' , G' und C' sind der Widerstands-, Induktivitäts-, Leitwert- und Kapazitätsbelag. Diese Parameter kann man beispielsweise mittels zweidimensionaler Simulation des Querschnitts ermitteln [61]. Der Leitwertbelag wird meist mit Null angenommen, da die Verluste im Dielektrikum vernachlässigbar gering sind.

Vernachlässigt man die Leitungsinduktivität, bekommt die Telegraphengleichung die Form einer Diffusionsgleichung und es wird möglich, die Lösung direkt im Zeitbereich zu berechnen [62].

Ausgehend von der Telegraphengleichung lassen sich auch analytische Näherungen im Zeitbereich ableiten, deren Auswertung einen sehr geringen Rechenaufwand benötigt und welche somit gut für die Schaltungssimulation eingesetzt werden können [63–65].

Auch für Leitungen über verlustbehaftetem Substrat lässt sich die Telegraphengleichung mittels einer quasistatischen Näherung entsprechend erweitern [66]. Um die Kopplungen zwischen

Leitungen zu berücksichtigen, kann die Theorie der Telegraphengleichungen auf Mehrleitersysteme erweitert werden.

Thermische Modellierung

In integrierten Schaltungen wird ein beträchtlicher Anteil der gesamten Leistung in den Verbindungsstrukturen in Wärme umgesetzt. Da SiO_2 eine viel geringere Wärmeleitfähigkeit als das Si-Substrat besitzt, kommt es dort bei hohen Strömen aufgrund der schlechten Wärmeableitung zu einem starken Temperaturanstieg, woraus sich eine Grenze für den maximal erlaubten Strom in einer Leitung ergibt [67]. Bei „low-k“-Dielektrika, die in der Regel eine noch geringere Wärmeleitfähigkeit haben, ist dieser Nachteil noch stärker ausgeprägt. Auch durch die Einführung neuer Strukturen wie SOI (*Silicon On Insulator*) [68] treten vermehrt Probleme mit der Wärmeableitung auf.

Die Modellierung des thermischen Verhaltens gestaltet sich leider etwas komplizierter, als dies etwa bei der Widerstands- oder Kapazitätsextraktion der Fall ist. An sich sind zwar die gleichen mathematischen Verfahren anwendbar, meist aber sind hier ein- oder zweidimensionale Näherungen nicht ausreichend, da üblicherweise der Bereich der Wärmeausbreitung viel größer als die laterale Ausdehnung der Wärmequellen ist.

Bedingt durch den geringen Querschnitt der Verbindungsleitungen sind die thermischen Zeitkonstanten sehr klein. Eine adiabatische Näherung ist deshalb nur für sehr kurze Stromimpulse (wenige Nanosekunden) zulässig [69].

Bei den meisten Anwendungen ist eine Genauigkeit der berechneten Temperatur von wenigen Prozent nur durch eine umfassende dreidimensionale Simulation mit einer numerischen Methode (z.B. FEM) erzielbar. Insbesondere für stationäre thermische Simulationen ist es notwendig, das Simulationsgebiet sehr groß anzulegen—wenn der Chip nicht direkt auf einem guten Wärmeleiter montiert ist, müssen Gehäuse und Anschlussleitungen in der Simulation mitberücksichtigt werden [70]. Es ist aber möglich einfache analytische Modelle mit wenigen Parametern zu entwickeln, die für bestimmte Strukturen gültig sind [71]. Diese Modelle müssen aber unbedingt anhand numerischer Simulationen oder Messungen kalibriert werden.

Um thermische Effekte auch in der Schaltungssimulation zu berücksichtigen, kann man das thermische Verhalten durch ein elektrisches Ersatzschaltbild beschreiben. Die elektrische Spannung in der Ersatzschaltung entspricht dabei einer Temperatur und der elektrische Strom einem Wärmestrom. Ähnlich wie bei der Widerstands- und Kapazitätsextraktion lässt sich ein Netzwerk thermischer Widerstände und Kapazitäten berechnen [72]. Elektrische Verlustleistung wird durch eine Stromquelle im thermischen System dargestellt. Rückwirkungen auf das elektrische System treten auf, wenn durch die Temperatur bestimmte elektrische Parameter (Leitfähigkeit) beeinflusst werden. Die thermische Ersatzschaltung kann dann gemeinsam mit dem elektrischen Netzwerk in einem Schaltungssimulator analysiert und getestet werden.

Kapitel 2

Grundlagen

In diesem Kapitel werden die für die elektrische und thermische Simulation wesentlichen physikalischen Zusammenhänge wiedergegeben und die entsprechenden partiellen Differentialgleichungen und Randbedingungen aufgestellt.

Das elektrische Verhalten eines Systems ist durch die vier Maxwell-Gleichungen

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = \rho, \quad (2.3)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad (2.4)$$

mit den Verknüpfungsbeziehungen

$$\mathbf{D} = \underline{\epsilon} \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2.6)$$

$$\mathbf{J} = \gamma \mathbf{E}, \quad (2.7)$$

gegeben. Im stationären Fall verschwinden die Zeitableitungen und (2.1), (2.2) vereinfachen sich zu

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \mathbf{J}, \quad (2.8)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0. \quad (2.9)$$

Aus (2.9) erkennt man, dass das stationäre elektrostatische Feld wirbelfrei ist. Es lässt sich deshalb durch den (negativen) Gradienten eines skalaren Potentials ausdrücken

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \varphi. \quad (2.10)$$

2.1 Kapazität

Für den stationären Fall mit linearer Dielektrizitätszahl ist das Verhältnis von Ladung Q und Spannung U zweier voneinander isolierter Leiter konstant und wird als Kapazität C bezeichnet

$$C = \frac{Q}{U}. \quad (2.11)$$

Da die Leiter im Inneren feldfrei sind, ist das Potenzial dort konstant und die Ladung ist ausschließlich auf der Oberfläche der Leiter verteilt.

Ladungsintegration

Die Ladungsverteilung ergibt sich aus der elektrischen Flussdichte \mathbf{D} gemäß der dritten Maxwell'schen Gleichung (2.3). Betrachtet man einen die Oberfläche eines Leiters umgebenden Bereich mit der Dicke d und lässt d gegen Null gehen, so erhält man die Flächenladungsdichte σ als Differenz der Normalkomponenten von \mathbf{D} außerhalb (\mathbf{D}_o) und innerhalb ($\mathbf{D}_i = 0$) des Leiters

$$\sigma = (\mathbf{D}_o - \mathbf{D}_i) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{D}_o \cdot \mathbf{n}, \quad (2.12)$$

wobei der Vektor \mathbf{n} normal auf die Leiteroberfläche steht und in Richtung Dielektrikum zeigt. Mittels *Ladungsintegration* über die Leiteroberfläche Γ_i

$$Q = \oint_{\Gamma_i} \sigma \, dA = \oint_{\Gamma_i} \mathbf{D}_o \cdot \mathbf{n} \, dA = \oint_{\Gamma_i} \underline{\epsilon} \mathbf{E} \cdot \mathbf{n} \, dA \quad (2.13)$$

kann man die gesamte auf einem Leiter gespeicherte Ladung berechnen. Über (2.11) lässt sich daraus die Kapazität zwischen zwei Leitern ermitteln.¹

Energiemethode

Als Alternative zur Ladungsintegration kann die Kapazität auch mit der *Energiemethode* ermittelt werden. Die in einem Kondensator gespeicherte Energie W lässt sich durch

$$W = \frac{CU^2}{2} \quad (2.14)$$

ausdrücken, die natürlich gleich der im elektrischen Feld enthaltenen Energie

$$W = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{E} \mathbf{D} \, d\Omega = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \mathbf{E} \underline{\epsilon} \mathbf{E} \, d\Omega \quad (2.15)$$

sein muss. Der Integrationsbereich Ω erstreckt sich über das gesamte Dielektrikum zwischen den Leitern und geht theoretisch bis ins Unendliche. Das elektrische Feld ladungsbalancierter Leiter klingt für Entfernungen, die groß sind gegenüber dem Durchmesser des Gebietes, das die Ladungen enthält, mit der dritten Potenz des mittleren Abstands ab. Deshalb ist der größte Teil der Feldenergie in der nächsten Umgebung der Leiter enthalten und der Integrationsbereich kann für praktische Anwendungen entsprechend verkleinert werden, ohne einen großen Fehler bei der Energieberechnung zu machen. In Abb. 2.1 ist grafisch dargestellt wie der Fehler der berechneten Kapazität in einem zweidimensionalen Beispiel von der Größe des Simulationsbereiches abhängig ist.

Abbildung 2.2 vergleicht den zwei- und den dreidimensionalen Fall. Das dreidimensionale Beispiel ist im Querschnitt mit dem zweidimensionalen ident, und die Länge des Leiters entspricht seiner Breite. Man erkennt, dass im zweidimensionalen Fall der Fehler der berechneten Kapazität quadratisch gegen Null geht, während im dreidimensionalen Fall eine Konvergenz mit der dritten Potenz von w beobachtbar ist.

¹Ein ladungsbalanciertes System sei vorausgesetzt.

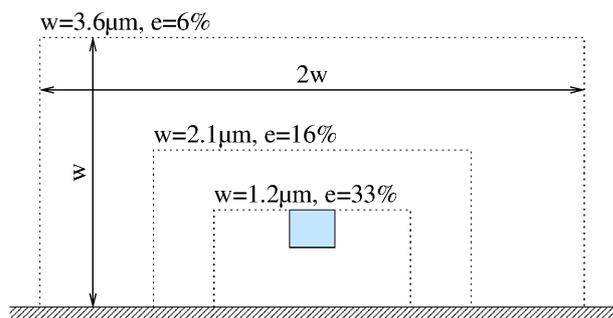


Abbildung 2.1: Auswirkung der Größe des Simulationsbereiches w auf den Fehler e der berechneten Kapazität in einem zwei-dimensionalen Beispiel

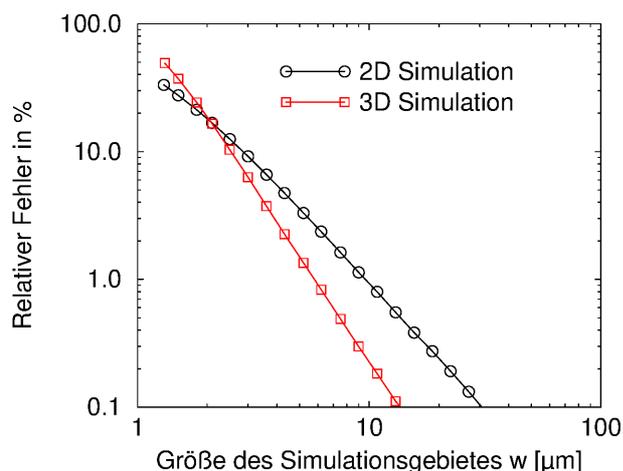


Abbildung 2.2: Vergleich der relativen Fehler, die durch die Einschränkung des Simulationsbereiches entstehen, im zwei- und im dreidimensionalen Fall: Man erkennt, dass im zweidimensionalen Fall der Fehler quadratisch und im dreidimensionalen Fall der Fehler mit der dritten Potenz gegen Null geht.

Feldberechnung

Sowohl die Energiemethode als auch das Verfahren der Ladungsintegration erfordern die numerische Berechnung des elektrischen Feldes. Anzumerken ist, dass bei der Ladungsintegration die Berechnung des Feldes auf der Leiteroberfläche ausreichend ist.

Setzt man (2.10) in (2.3) ein und berücksichtigt, dass in den Isolatoren keine elektrischen Ladungen vorhanden sind ($\rho = 0$) erhält man die Euler-Gleichung

$$\operatorname{div}(\underline{\epsilon} \operatorname{grad} \varphi) = 0. \quad (2.16)$$

Randbedingungen

Das Gebiet Ω , auf dem Gleichung (2.16) gelöst werden soll wird durch mehrere Flächen berandet (Abb. 2.3). Die konstanten Potenziale der Leiteroberflächen stellen *Dirichlet-Bedingungen* dar

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \varphi(\mathbf{r}) = V_i, \quad (2.17)$$

wobei mit Γ_i die Oberfläche des Leiters i bezeichnet wird. Wenn man für die numerische Berechnung das Simulationsgebiet nach außen hin begrenzt, benötigt man auch für Γ_a eine Randbedingung, die man sinnvollerweise so wählt, dass die Oberfläche ladungsfrei bleibt, also $D\mathbf{n} = 0$ gilt, oder durch das Potenzial ausgedrückt:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_a : \mathbf{n} \underline{\epsilon} \operatorname{grad} \varphi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.18)$$

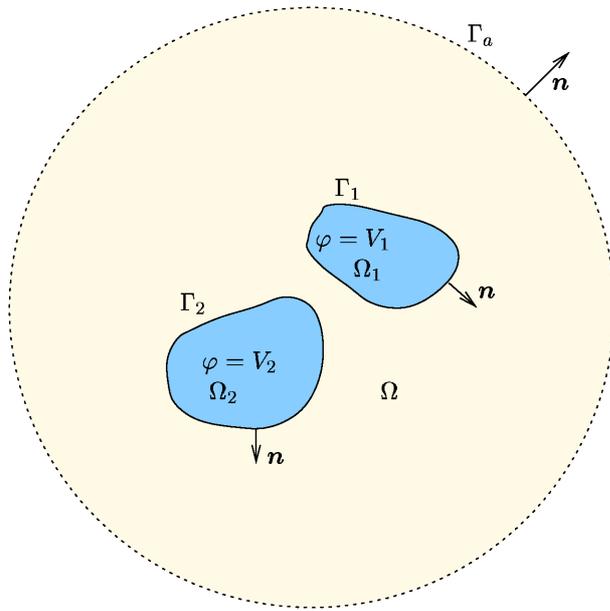


Abbildung 2.3: Simulationsbereich und Ränder bei der Berechnung des elektrischen Feldes: Die beiden Elektroden Ω_1 und Ω_2 liegen auf konstanten Potenzialen (V_1 bzw. V_2) und bilden somit Dirichlet-Bedingungen. Der äußere Rand (punktierte Linie) wird durch eine homogene Neumann-Bedingung modelliert.

Diese Art von Randbedingung wird *homogene Neumann-Bedingung* genannt. Oberflächen, auf denen eine fixe elektrische Flächenladungsdichte σ eingepreßt ist, lassen sich durch allgemeine *Neumann-Bedingungen* darstellen:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_n : \mathbf{n} \underline{\epsilon} \text{grad } \varphi(\mathbf{r}) = \sigma . \quad (2.19)$$

Eine spezielle Art von Randbedingung wird für den Fall benötigt, wenn sich im Dielektrikum zwischen den beiden Leitern, deren Kapazität berechnet werden soll, ein weiterer leitender Körper befindet, der nicht mittels einer Dirichlet-Bedingung auf ein fixes Potenzial gelegt werden soll. Da hier wie in jedem Leiter $\mathbf{E} = 0$ gilt, muss zwar das Potenzial auf der gesamten Oberfläche des Leiters Γ_f gleich groß sein, es wird aber mit einem noch unbekanntem Wert V_f angenommen:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_f : \varphi(\mathbf{r}) = V_f . \quad (2.20)$$

Da dieser Leiter über keine elektrischen Anschlüsse verfügt, können Ladungen auf der Oberfläche rein durch Influenz entstehen und müssen in Summe Null ergeben:

$$\oint_{\Gamma_f} (\underline{\epsilon} \text{grad } \varphi) \mathbf{n} \, dA = 0 . \quad (2.21)$$

Dieser Typ von Randbedingung wird *schwebende Randbedingung* (Floating Boundary) genannt.

Teilkapazitäten

Bisher wurden zur Kapazitätsberechnung immer nur Zweileitersysteme herangezogen. Geht man jedoch von n Leitern aus, so kann man von jedem Leiter zu jedem anderen eine Kapazität definieren, man erhält also insgesamt $\frac{1}{2}n(n-1)$ Teilkapazitäten (siehe Beispiel in Abb. 2.4).

Für eine bestimmte Konfiguration von Potenzialen auf den einzelnen Leitern (V_1, V_2, \dots, V_n) kann man die Gesamtenergie als Summe der einzelnen Energien in den $\frac{1}{2}n(n-1)$ Teilkapazitäten

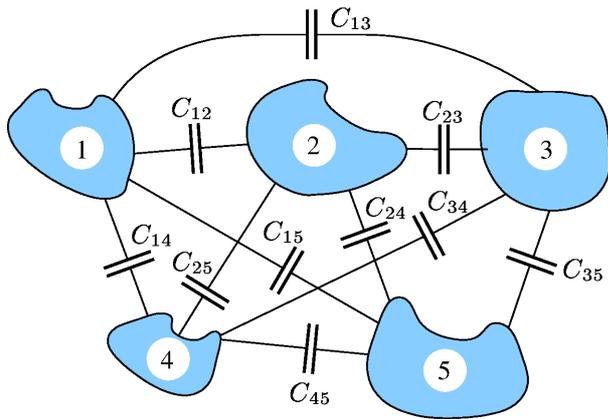


Abbildung 2.4: Zehn Teilkapazitäten in einem 5-Leiter Problem

anschreiben:

$$W = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{C_{ij} (V_i - V_j)^2}{2} . \quad (2.22)$$

Man erhält also eine Gleichung mit $\frac{1}{2}n(n-1)$ Unbekannten. Da für eine Lösung $\frac{1}{2}n(n-1)$ Gleichungen benötigt werden, berechnet man die Gesamtenergie für $\frac{1}{2}n(n-1)$ verschiedene Potenzialkonfigurationen der Leiter. Aus dem entstandenen linearen System lassen sich dann die Teilkapazitäten bestimmen.

2.2 Leitungswiderstand

Gemäß dem Ohm'schen Gesetz ist der elektrische Widerstand eines Leiters als das Verhältnis von Klemmenspannung und Strom definiert:

$$R = \frac{U}{I} . \quad (2.23)$$

Der Widerstand einer Leitung kann nun berechnet werden, indem man an den Enden des Leiters eine Spannung anlegt und den Leitungsstrom durch Integration über eine Kontaktfläche des Leiters Γ_i ermittelt

$$I = \int_{\Gamma_i} \mathbf{J} \mathbf{n} \, dA , \quad (2.24)$$

oder man erhält den Widerstand aus der elektrischen Verlustleistung im Leiter

$$P = \frac{U^2}{R} = \int_{\Omega} \mathbf{E} \mathbf{J} \, d\Omega . \quad (2.25)$$

Feldberechnung

Für die Berechnung des elektrischen Feldes geht man wieder vom zeitlich unveränderlichen Fall aus und nimmt die elektrische Feldstärke als reines Gradientenfeld gemäß (2.10) an. Ferner lässt sich zeigen, dass die Stromdichte \mathbf{J} quellenfrei ist, indem man den Divergenzoperator auf (2.8) anwendet:

$$\operatorname{div} \mathbf{J} = 0 . \quad (2.26)$$

Setzt man nun (2.7) ein, erhält man die folgende Differentialgleichung für das elektrische Potenzial in einem Leiter

$$\operatorname{div}(\gamma \operatorname{grad} \varphi) = 0 \quad (2.27)$$

mit der Leitfähigkeit γ . Man erkennt, dass diese Gleichung vom gleichen Typ wie (2.16) ist.

Randbedingungen

Der Bereich Ω , auf dem (2.27) gelöst werden soll, entspricht dem Inneren des stromführenden Leiters. Der Teil der Oberfläche, der ausschließlich von Isolatoren umgeben ist und keine Kontakte enthält (Γ_a), stellt für das Potenzial eine *homogene Neumann-Bedingung* dar, da kein Strom vom Leiter in den Isolator fließen kann ($\mathbf{Jn} = 0$), und somit gilt:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_a : \mathbf{n} \operatorname{grad} \varphi(\mathbf{r}) = 0 . \quad (2.28)$$

An den Kontaktflächen Γ_i wird üblicherweise ein konstantes Potenzial V_i vorgegeben, was eine *Dirichlet-Bedingung* darstellt:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \varphi(\mathbf{r}) = V_i . \quad (2.29)$$

Alternativ zu einem konstanten Potenzial könnte man auch an den Kontakten eine konstante Stromdichte J_i (normal zur Oberfläche) einprägen (*inhomogene Neumann-Bedingung*)

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \mathbf{n} \gamma \operatorname{grad} \varphi(\mathbf{r}) = J_i . \quad (2.30)$$

Wenn man hingegen anstatt der Stromdichteverteilung den Gesamtstrom I_f angeben möchte und gleichzeitig ein konstantes Potenzial mit einem noch unbekanntem Wert V_f fordert, ergibt das eine *schwebende Randbedingung*

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \varphi(\mathbf{r}) = V_f , \quad (2.31)$$

$$\oint_{\Gamma_i} (\gamma \operatorname{grad} \varphi) \mathbf{n} \, dA = I_f . \quad (2.32)$$

Wenn das Gebiet Ω ausschließlich von Neumann-Bedingungen oder schwebenden Randbedingungen umgeben ist, dann hat (2.27) keine eindeutige Lösung für das Potenzial. Durch die Wahl eines beliebigen Potenzialwertes in einem beliebigen Punkt $\mathbf{p} \in \Omega$ kann die Eindeutigkeit wieder hergestellt werden

$$\varphi(\mathbf{p}) = V_{\text{ref}}, \quad \mathbf{p} \in \Omega . \quad (2.33)$$

Die folgende globale Verträglichkeitsbedingung muß immer erfüllt sein

$$\sum_i \int_{\Gamma_i} J_i \, dA + \sum_i I_f = 0 . \quad (2.34)$$

Sie sagt aus, dass die Summe der Ströme (bzw. Stromdichten) über die gesamte Leiteroberfläche gleich Null sein muss. Ist mindestens eine Dirichlet-Bedingung vorhanden, so erfüllt die Lösung für das Potenzial φ diese Bedingung automatisch, gibt es jedoch nur Neumann'sche und schwebende Randbedingungen, so muss (2.34) für den Rand garantiert sein.

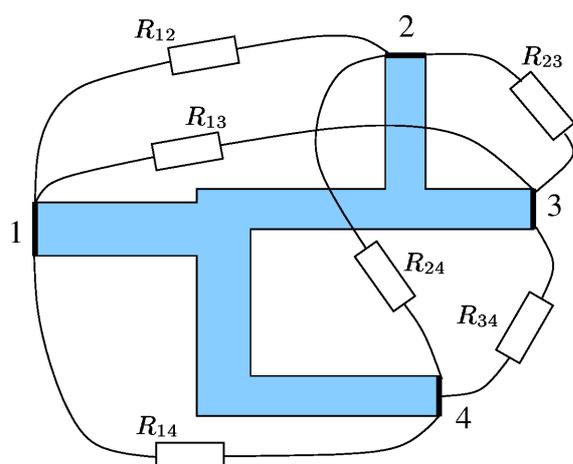


Abbildung 2.5: Sechs Teilwiderstände als Ersatzschaltung für eine Leitung mit vier Kontakten

Teilwiderstände

Wenn ein Leiter mehr als nur zwei Kontakte aufweist, kann man ähnlich wie zuvor bei den Teilkapazitäten Teilwiderstände definieren (Abb. 2.5).

Für die Berechnung der $\frac{1}{2}n(n-1)$ Teilwiderstände, die von n Kontakten gebildet werden, benötigt man die Leistungen P für $\frac{1}{2}n(n-1)$ verschiedene Konfigurationen von Kontaktpotenzialen, um aus einem linearen System von $\frac{1}{2}n(n-1)$ Gleichungen der Form

$$P = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{1}{R_{ij}} (V_i - V_j)^2 \quad (2.35)$$

die Reziprokwerte der Teilwiderstände (das sind die Teileitwerte) als Lösung zu erhalten.

2.3 Elektro-quasistatische Analyse

Bei den obigen Berechnungen von Kapazität und Widerstand wurde immer vom stationären Fall ausgegangen. Für zeitlich veränderliche Signale ist die Spannung entlang einer Leitung nicht mehr konstant und kann deshalb nicht mehr durch eine diskrete Kapazität und einen Widerstand modelliert werden. Man kann nun versuchen die Leitung in kurze Teilstücke zu gliedern und jedes dieser Stücke durch ein RC-Glied zu modellieren. Ein genaueres Ergebnis für allgemeine Strukturen erzielt man jedoch, wenn man Widerstand und Kapazität als verteilte Größen betrachtet und direkt eine dreidimensionale transiente Feldberechnung durchführt.

Wie in der Einleitung erwähnt, sind induktive Effekte für einen Großteil der Verbindungsleitungen auf integrierten Schaltungen vernachlässigbar, deshalb soll in diesem Modell das magnetische Feld unberücksichtigt bleiben. Man nimmt daher das elektrische Feld nach wie vor als ein reines Gradientenfeld gemäß (2.10) an. In (2.3) eingesetzt ergibt das

$$\operatorname{div}(\underline{\epsilon} \operatorname{grad} \varphi) = -\rho. \quad (2.36)$$

Wendet man auf (2.1) den Divergenzoperator an, erhält man

$$\operatorname{div} \mathbf{J} + \operatorname{div} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} = -\operatorname{div} \gamma \operatorname{grad} \varphi + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (2.37)$$

Gleichung 2.36 nach der Zeit abgeleitet und in (2.37) eingesetzt, ergibt somit die Differentialgleichung für das transiente Verhalten des elektrischen Potentials:

$$\operatorname{div}(\gamma \operatorname{grad} \varphi + \underline{\epsilon} \operatorname{grad} \frac{\partial \varphi}{\partial t}) = 0. \quad (2.38)$$

Der Simulationsbereich Ω erstreckt sich sowohl über die Leiter als auch über das Dielektrikum und geht theoretisch bis ins Unendliche. Praktisch braucht man jedoch wie bei der Kapazitätsberechnung die Gleichung lediglich in der näheren Umgebung der Leitung(en) lösen.

Randbedingungen

Die Kontakte an den Leitungen, an denen eine konstante Spannung vorgegeben werden soll, können wie im stationären Fall durch einen *Dirichlet-Bedingung* modelliert werden (2.17).

Wird hingegen von außen eine flächenhafte Stromdichte eingepreßt, so kann das einen Strom ins Innere und/oder eine Änderung der Flächenladungsdichte am Rand zur Folge haben. Für eine Randfläche gilt deshalb

$$J_n - \mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n} = \frac{\partial \sigma}{\partial t}, \quad (2.39)$$

wobei J_n die von außen eingepreßte Stromdichte normal auf die Oberfläche, $\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n}$ die Normalkomponente der Stromdichte im Inneren und σ die Flächenladungsdichte auf der Oberfläche ist. Auf Randflächen ohne von außen eingepreßten Strom muss demnach

$$\mathbf{J}_i \cdot \mathbf{n} = -\frac{\partial \sigma}{\partial t} \quad (2.40)$$

gelten. Diese beiden Forderungen können durch *Neumann-Bedingungen* verwirklicht werden.

Anfangsbedingungen

Um eine eindeutige Lösung der partiellen Differentialgleichung (2.38) zu erhalten, muss zusätzlich zu den Randbedingungen eine Anfangsbedingung für das Potential festgelegt werden. Demnach entspricht das Potential Zeitpunkt $t = 0$ einer vorgegebenen Verteilung φ_0

$$\forall \mathbf{r} \in \Omega, t = 0 : \quad \varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}). \quad (2.41)$$

Üblicherweise werden elektrisch isolierende Gebiete Ω_I frei von Raumladungen angenommen. Diese Tatsache muss natürlich auch in der Anfangsbedingung berücksichtigt werden. Das Potential darf deshalb lediglich in elektrisch leitenden Bereichen Ω_L frei gewählt werden

$$\forall \mathbf{r} \in \Omega_L, t = 0 : \quad \varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}). \quad (2.42)$$

Für das Potential φ_0 innerhalb der Isolatoren Ω_I gilt (2.16) mit dem Potentialverlauf am Rand von Ω_L als Dirichlet-Bedingung.

2.4 Wärmeleitung

Für eine gekoppelte elektro-thermische Simulation muss zusätzlich zu den Gleichungen des elektrischen Systems die Wärmeleitungsgleichung gelöst werden

$$\operatorname{div}(\gamma_T \operatorname{grad} T) = c_p \rho_m \frac{\partial T}{\partial t} - p. \quad (2.43)$$

Für den zeitlich unveränderlichen Zustand gilt folgende Vereinfachung:

$$\operatorname{div}(\gamma_T \operatorname{grad} T) = -p. \quad (2.44)$$

Das Ergebnis dieser Differentialgleichungen ist die Temperatur T . Die Eigenschaften des Materials gehen durch die thermische Leitfähigkeit γ_T , die spezifische Wärmekapazität c_p und die Dichte ρ_m in die Gleichung ein. Die Wärmequellendichtefunktion p entspricht der elektrischen Verlustleistung und berechnet sich aus

$$p = \gamma(\operatorname{grad} \varphi)^2. \quad (2.45)$$

Diese Gleichung stellt die Kopplung zwischen dem elektrischen und dem thermischen System dar.

Sowohl die elektrische Leitfähigkeit γ als auch die thermische Leitfähigkeit γ_T vieler Materialien ist temperaturabhängig; sie werden durch das folgende Modell angenähert:

$$\gamma(T) = \frac{\gamma_0}{1 + \alpha(T - T_0) + \beta(T - T_0)^2}. \quad (2.46)$$

Mit γ_0 wird die (elektrische bzw. thermische) Leitfähigkeit bei einer bestimmten Referenztemperatur T_0 (z.B. 300 K) bezeichnet. Die Faktoren α und β werden als linearer bzw. quadratischer Temperaturkoeffizient bezeichnet.

Für *Metalle* gilt das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{\gamma_T}{\gamma_E} = T \cdot \text{const}, \quad (2.47)$$

welches besagt, dass das Verhältnis aus thermischer zu elektrischer Leitfähigkeit proportional zur absoluten Temperatur ist. Deshalb können die Temperaturkoeffizienten der thermischen Leitfähigkeit von Metallen (α_T , β_T) näherungsweise aus denen ihrer elektrischen Leitfähigkeit (α_E , β_E) bestimmt werden:

$$\alpha_T \approx \alpha_E - \frac{1}{T_0}, \quad (2.48)$$

$$\beta_T \approx \beta_E - \frac{\alpha_E}{T_0} + \frac{1}{T_0^2}. \quad (2.49)$$

Auch die Wärmekapazität c_p mancher Materialien weist eine Abhängigkeit von der Temperatur auf. Sie wird durch die Shomate-Gleichung [73]

$$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + \frac{E}{T^2} \quad (2.50)$$

modelliert, wobei für T die absolute Temperatur in Kelvin eingesetzt wird.

Durch die Temperaturabhängigkeiten der elektrischen und thermischen Leitfähigkeiten bekommt das Gleichungssystem einen (schwach) nichtlinearen Charakter.

Auch die Massendichte ρ_m ist von der Temperatur abhängig. In dem hier verwendeten Modell bleibt diese Abhängigkeit jedoch unberücksichtigt, da sonst die *Masseerhaltung* nicht mehr gegeben wäre. Wollte man eine temperaturabhängige Massendichte berücksichtigen, so wäre es notwendig, zusätzlich noch die thermisch bedingte Volumsvergrößerung in einem mechanischen System zu berechnen.

Randbedingungen

Für den elektrischen Teil des Systems können Randbedingungen angegeben werden, wie sie bereits bei der Widerstandsberechnung beschrieben wurden. Für den thermischen Bereich sind folgende Ränder vorgesehen: Ein (idealer) Kühlkörper, der an einem Teil des Randes Γ_i an das Simulationsgebiet angrenzt, mit einer konstanten Temperatur K_i , wird durch *Dirichlet-Bedingungen* modelliert:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : T(\mathbf{r}) = K_i . \quad (2.51)$$

Ein adiabatischer (ideal wärmeisolierender) Rand wird durch eine *homogene Neumann-Bedingung* dargestellt:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \mathbf{n} \operatorname{grad} T(\mathbf{r}) = 0 . \quad (2.52)$$

Externe Wärmequellen, die eine konstante Wärmestromdichte Θ_i normal zum Rand einprägen, bedeuten eine *inhomogene Neumann-Bedingung*:

$$\forall \mathbf{r} \in \Gamma_i : \mathbf{n} \gamma_T \operatorname{grad} T(\mathbf{r}) = \Theta_i . \quad (2.53)$$

Anfangsbedingung

Bei zeitlich veränderlichen Wärmeleitungsproblemen muss zusätzlich für die Temperatur eine Anfangsbedingung T_0 vorgegeben werden

$$\forall \mathbf{r} \in \Omega, t = 0 : T(\mathbf{r}, t) = T_0(\mathbf{r}) . \quad (2.54)$$

Kapitel 3

Numerische Feldberechnung

Wie bereits in der Einleitung erwähnt wurde, stellen die Berechnungen der Potenzial- bzw. der Temperaturverteilung Rand- und Anfangswertaufgaben dar, für die lediglich bei sehr einfachen Geometrien eine analytische Lösung gefunden werden kann. Für allgemeine dreidimensionale Strukturen müssen deshalb numerische Methoden angewandt werden, die zur räumlichen Diskretisierung der partiellen Differentialgleichungen dienen, mit denen diese in ein algebraisches Gleichungssystem übergeführt werden. Im Folgenden soll überblicksartig auf die gebräuchlichsten Diskretisierungsverfahren eingegangen und ihre Eignung für die Berechnung elektrischer Felder bzw. thermische Simulation diskutiert werden.

3.1 Finite Differenzen

Bei der Diskretisierung mit Finiten Differenzen werden die Ableitungen des Differentialoperators durch Differenzenquotienten angenähert. Man verwendet dazu üblicherweise ein strukturiertes Gitter und erhält für jeden Knoten eine algebraische Gleichung in den unbekanntenen Funktionswerten des Gitterpunktes und seiner Nachbarn.

Das resultierende Gleichungssystem hat eine spärlich besetzte Systemmatrix und kann mit iterativen Verfahren effizient gelöst werden.

Beim klassischen Finite Differenzen-Ansatz sind die Gitterlinien zu den Koordinatenachsen parallel (Ortho-Produkt-Gitter). Solche Gitter sind sehr einfach zu erzeugen und es werden keine aufwendigen Datenstrukturen benötigt. Ein effizienter Zugriff auf die Gitterpunkte und den ihnen zugeordneten Funktionswerten kann mit geringem Aufwand implementiert werden. Ein solcher Ansatz ist aber nur für rechteckige bzw. quaderförmige Simulationsgebiete geeignet. Er kann jedoch für Gebiete, deren Berandung nicht achsparallel ist, durch Einfügen zusätzlicher Gitterknoten an den Schnittpunkten der Berandung mit den Gitterlinien erweitert werden. Ortho-Produkt-Gitter haben den Nachteil, dass man aufgrund ihrer Regelmäßigkeit nur sehr wenig Einfluss auf die Gitterdichte nehmen kann. Abhilfe lässt sich durch sogenannte *Terminating Gridlines* schaffen. Darunter versteht man, dass einzelne Gitterlinien (bzw. in 3D Gitterebenen) lediglich in Bereichen, wo hohe Gitterdichte gewünscht ist, existieren und außerhalb abgebrochen werden (Abb. 3.1). Man verliert dadurch allerdings den Vorteil der regelmäßigen Datenstruktur.

Die Methode der Finiten Differenzen kann aber auch für allgemein berandete Gebiete verwendet werden, indem man das Gebiet sowie den Differentialoperator auf ein Quader bzw. Rechteckgebiet transformiert. Eine Verallgemeinerung der Finite Differenzen Methode auf un-

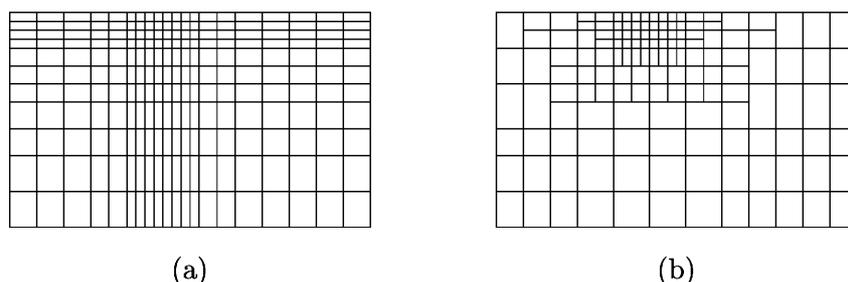


Abbildung 3.1: Rechteckgitter für die Finite Differenzen Methode ohne (a) und mit (b) „Terminating Gridlines“

strukturierte Gitter (z.B. Dreiecks- oder Tetraedergitter) kann mittels *Boxintegration* erreicht werden. Durch die Geometriekonformität unstrukturierter Gitter lassen sich damit Ränder und Materialgrenzen einfacher behandeln und brauchen nicht mehr mit extrem hohen Gitterdichten aufgelöst werden.

Die Finite Differenzen Methode wird häufig in der Simulation von Halbleiterbauelementen zur Diskretisierung der Halbleitergleichungen eingesetzt, kann aber freilich auch zur Kapazitätsberechnung herangezogen werden [74–77]. In [78] wird mittels Finiter Differenzen eine Diskretisierung der kompletten Maxwell-Gleichungen und eine Lösung im Zeitbereich erreicht.

3.2 Finite Elemente

Bei der Finiten Elemente Methode (FEM) wird versucht, die unbekannte exakte Lösung der partiellen Differentialgleichung durch die gewichtete Summierung einer Reihe von Ansatzfunktionen „möglichst gut“ anzunähern. Dafür wird meist ein unstrukturiertes geometriekonformes Gitter (Dreiecksgitter, Tetraedergitter, ...) benutzt. Die einzelnen Ansatzfunktionen sind in der Regel den Gitterpunkten zugeordnet¹ und werden so gewählt, dass am Rand zumindest die Dirichlet-Bedingungen exakt erfüllt sind. Die Ansatzfunktionen sollen so formuliert sein, dass mit ausreichend großer Anzahl von Ansatzfunktionen jede exakte Lösung mit beliebiger Genauigkeit angenähert werden kann. Die „möglichst gute“ Näherung erreicht man, indem man die Differenz zwischen exakter und Näherungslösung, das Residuum, gewichtet über das Simulationsgebiet integriert und dabei fordert, dass für einen Satz von linear unabhängigen Gewichtsfunktionen diese Integrale verschwinden (Methode der gewichteten Residuen). Alternativ dazu lässt sich eine Näherungslösung finden, indem man die partielle Differentialgleichung als Variationsproblem formuliert und das erhaltene Funktional stationär werden lässt (Verfahren von Ritz).

Beide Methoden erfordern die Lösung eines Integrals über das gesamte Simulationsgebiet, was durch Summierung über die Beiträge der einzelnen Gitterelemente erreicht wird. Programmierlich lässt sich durch die abstrakte Formulierung von Gitterelementen ein objektorientierter Ansatz verwirklichen und ein einheitlicher Programmablauf für verschiedene Arten von Gitterelementen (z.B. ein-, zwei- oder dreidimensionale) wird möglich.

Durch geeignete Wahl der Ansatzfunktionen (Anpassung an die erwartete Lösung, bzw. an die Eigenfunktionen des Differentialoperators) lässt sich mit Finiten Elementen eine hohe Ge-

¹Bei der Berechnung von Vektorfeldern verwendet man oft auch Ansatzfunktionen, die den Gitterlinien zugeordnet sind. Die Gitterelemente werden dann „Edge Elements“ (Kantenelemente) genannt.

nauigkeit selbst bei geringer Gitterdichte erreichen. Mehrere Teilbereiche mit unterschiedlichen Materialeigenschaften (γ , γ_T , $\underline{\epsilon}$) stellen kein Problem dar, ebenso lassen sich Anisotropie, Inhomogenitäten und Nichtlinearitäten berücksichtigen.

Werden bei der Finiten Elemente Methode keine Randbedingungen angegeben, so erhält man an diesen Stellen automatisch homogene Neumann-Bedingungen (natürliche Randbedingungen). Dies erweist sich besonders bei der Widerstandsberechnung als vorteilhaft, da dort der größte Teil der Leiteroberfläche ein Neumann-Rand ist.

Eine nachteilige Eigenschaft ist, dass sich die Konditionszahl der Systemmatrix mit steigender Gitterdichte verschlechtert [79]. Erfahrungsgemäß muss man vor allem bei der Widerstandsextraktion darauf Rücksicht nehmen, da die hier auftretenden Gleichungssysteme ohnehin schlecht konditioniert sind. Dies wird durch die meist langgestreckten, isotrop vergitterten geometrischen Strukturen verursacht. Es empfiehlt sich deshalb in diesem Fall anstatt eines iterativen ein direktes Lösungsverfahren anzuwenden (z.B. Gauß'sche Elimination). Der an sich höhere Aufwand an Rechenzeit und Speicherbedarf bei der Gauß'schen Elimination lässt sich durch geeignete Wahl der Eliminationsreihenfolge [80] sowie durch das Zusammenlegen mehrerer Knoten zu sogenannten *Articulation Nodes* [81] deutlich reduzieren.

Bei der Kapazitätsberechnung ist das entstehende lineare Gleichungssystem meist sehr gut konditioniert und die Lösung kann mit iterativen Lösungsverfahren sehr effizient ermittelt werden [82–84].

Mit der FEM erhält man eine Näherungslösung der gesuchten physikalischen Größe, die nicht nur in den Gitterknoten, sondern am gesamten Simulationsgebiet definiert ist—im Gegensatz zur FDM, wo die Lösung streng genommen nur auf den Gitterpunkten bekannt ist.

3.3 Boundary Element Methode

Die Boundary Element Methode (BEM) gehört zu den randorientierten Diskretisierungsmethoden, das bedeutet, dass sie mit einem Gitter am Rand des Simulationsbereiches auskommt und keine Gitterpunkte im Inneren benötigt. Diese Methode ist allerdings nur dann anwendbar, wenn die Fundamentallösung der Differentialgleichung bekannt ist. Beispielsweise geht man bei der Berechnung des elektrischen Feldes davon aus, dass elektrische Ladungen ausschließlich auf der Oberfläche der Elektroden vorhanden sind. Das elektrische Potenzial an einem Punkt \mathbf{r} lässt sich dann als Integral über alle elektrische Ladungen (auf den Oberflächen aller Leiter $\Gamma = \bigcup \Gamma_i$) berechnen:

$$u(\mathbf{r}) = \int_{\Gamma} G(\mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) \sigma(\bar{\mathbf{r}}) dA \quad (3.1)$$

Die Fundamentallösung $G(\mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}})$ (Green'sche Funktion des unendlichen Raumes) beschreibt den Einfluss einer Punktladung im Punkt $\bar{\mathbf{r}}$ auf das Potenzial an der Stelle \mathbf{r} . Für den leeren Raum gilt:

$$G(\mathbf{r}, \bar{\mathbf{r}}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \bar{\mathbf{r}}|} \quad (3.2)$$

Um das Integral (3.1) zu lösen, vergittert man die Oberfläche der Leiter und berechnet den Einfluss der Ladung in jedem Element auf das Potenzial jedes anderen Elementes entweder durch Kollokation oder, wie bei der Finiten Elemente Methode, mit einer Testfunktion t_i . Man erhält ein Gleichungssystem mit einer vollbesetzten Systemmatrix von einer Ordnung, die der Anzahl der Gitterknoten auf den Leiteroberflächen entspricht. Die Ordnung der Matrix ist damit

deutlich geringer als bei der Finiten Elemente oder Finiten Differenzen Methode. Allerdings ist die Lösung eines vollbesetzten Gleichungssystems aufwendiger als die eines spärlich besetzten, sodass ein Teil dieses Vorteils wieder eingebüßt wird.

Sind mehrere Materialien mit unterschiedlichen Dielektrizitätszahlen vorhanden, ist es meist schwierig die dazu passende Green'sche Funktion zu finden. Beispielsweise lässt sich für mehrere ebene Lagen unterschiedlicher Materialien die Green'sche Funktion durch „Spiegelladungen“ [85] oder durch ein Fourier-Integral ermitteln [86].

Allgemeine Geometrien kann man mit der BEM nur berechnen, indem man sämtliche Materialgrenzen ebenfalls mit Randelementen diskretisiert, um die dort auftretende Polarisationsladung zu berücksichtigen. Systeme mit einer großen Anzahl von Materialgrenzen sowie homogenen Neumann-Bedingungen lassen die Ordnung des Gleichungssystems schnell ansteigen und die Effizienz dieses Verfahrens sinkt. Inhomogene und nichtlineare Materialien können mit der Boundary Element Methode überhaupt nicht berechnet werden. Eine Begrenzung des Simulationsgebietes nach außen (so wie bei der FDM und FEM) ist nicht erforderlich, da durch die Green'sche Funktion implizit die Wirkung des elektrischen Feldes bis ins Unendliche enthalten ist.

Um den Rechenaufwand zur Lösung des Gleichungssystems zu verkleinern, kann man die Einflüsse zweier weit entfernter Gruppen benachbarter Randelemente zusammenfassen indem man deren Green'sche Funktionen mittels Multipol-Expansion bzw. einer Taylor-Reihe annähert und dadurch eine Reduktion der Systemmatrix erreicht [87, 88]. Es besteht aber auch die Möglichkeit die Einflüsse von sehr weit entfernten Elementen derart zu vernachlässigen, dass an diesen Stellen in der inversen Systemmatrix keine Kopplungen auftreten und Bandstruktur erreicht wird. Damit kann der Aufwand zur Lösung reduziert werden (Schur-Inversion [89]). Eine weitere Reduktion des Rechenaufwandes lässt sich erzielen, indem man die Integration der Green'schen Funktion durch eine numerische Näherung basierend auf einer Multipol-Expansion beschleunigt [90, 91]. Mittels Eigenwertzerlegung [92, 93], Wavelet-ähnlichen Methoden [94] oder auf FFT basierenden Verfahren [95] kann man erreichen, dass die Besetzungsdichte der Systemmatrix reduziert und iterative Lösungsverfahren somit beschleunigt werden. Singularitäten der Green'schen Funktion verkomplizieren die Integration, doch oft lassen sich für die singulären Integrale analytische Lösungen finden [96, 97].

Die Boundary Element Methode wird bevorzugt zur Kapazitätsberechnung eingesetzt [98–102], aber auch zur Berechnung von Substratwiderständen [103, 104], da hier keine unregelmäßigen Neumann-Bedingungen auftreten.

3.4 Hybride Methoden

Es ist möglich die Vorteile von FEM und BEM zu vereinigen, indem man die beiden Methoden kombiniert anwendet. Das Gesamtgebiet wird dazu in mehrere Teilgebiete zerlegt. Gebiete, in denen die Boundary Element Methode nicht oder nur ineffizient angewendet werden kann, weil z.B. viele verschiedenen Materialien mit nicht-planaren Grenzschichten vorkommen, Inhomogenitäten, oder Nichtlinearitäten auftreten, werden dann mit der Finite Elemente Methode diskretisiert, der Rest mit Randelementen. Die Schwierigkeit liegt dabei in der Modellierung der Grenzschichten zwischen den Simulationsgebieten. Ein Nachteil ist auch die Tatsache, dass aufgrund der Diskretisierung mit Randelementen (leicht) asymmetrische Systemmatrizen entstehen können und den Vorteil der symmetrischen Matrizen bei der FEM zunichte machen. Da

diese Asymmetrie keine physikalische Ursache hat, sondern rein von der Art der Diskretisierung herrührt, wird in der Literatur häufig ein heuristische Ansatz vorgeschlagen, welcher nur den symmetrischen Anteil berücksichtigt.

Eine Anwendung der Hybridelementmethode zur Berechnung von Kapazitäten ist in [105] beschrieben.

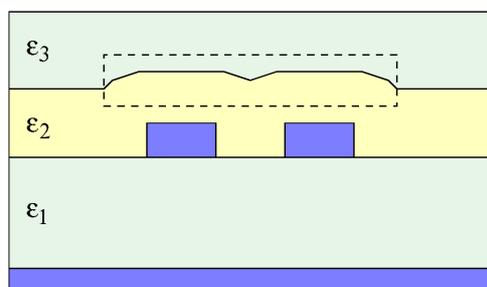


Abbildung 3.2: Anwendung der Hybridelementmethode bei der Kapazitätsberechnung: Der Bereich innerhalb des strichliert eingezeichneten Rechtecks wird aufgrund des nicht-planaren Übergangs zwischen den beiden Dielektrika mit finiten Elementen diskretisiert, der Rest mit der Boundary Element Methode.

Eine weitere Möglichkeit, die Vorteile von volumenorientierten Methoden, wie FEM oder FDM mit denen von Randintegralverfahren (z.B. BEM) zu kombinieren, kann mit der *Measured Equation of Invariance* (MEI) Methode erzielt werden. Dabei verwendet man ein dreidimensionales Gitter, das die Oberfläche der Elektroden bis zu einer gewissen Dicke umgibt. Innerhalb des vergitterten Volumens wird mit einer herkömmlichen FDM- oder FEM-Diskretisierung die Systemmatrix aufgestellt. Die Kopplungen am äußeren Rand des Gitters werden mit einem Ansatz, der auf Green'schen Funktionen basiert, bestimmt. Man erhält dadurch ein Gleichungssystem, dessen Ordnung (wie bei der BEM) proportional zur Oberfläche der Elektroden ist, trotzdem aber spärlich besetzt ist (wie bei der FEM oder FDM) und deshalb effizient mit iterativen Verfahren gelöst werden kann. Der numerische Aufwand dieser Methode ist deshalb von der Berechnung der Greenschen Funktionen dominiert. In [106] wird die MEI-Methode zur dreidimensionalen Berechnung von Kapazitäten eingesetzt. Gegenüber der BEM kann hier ein Reduktion der CPU-Zeit um bis zu einem Faktor 10 erreicht werden.

3.5 Stochastische Methoden

In [107–109] wird ein stochastisches Verfahren zur Kapazitätsberechnung vorgeschlagen, welches als *Random Walk Methode* bezeichnet wird. Es basiert auf der Lösung der Laplace-Gleichung in einem skalierbaren Würfel mit beliebigen Dirichlet-Bedingungen. Mittels eines Randintegrals werden das Potenzial und das elektrische Feld im Zentrum des Würfels berechnet. Die Kapazität zwischen zwei beliebigen Elektroden kann nun als unendliche Reihe verschachtelter Randintegrale ausgedrückt werden. Aus dieser Reihe lassen sich Wahrscheinlichkeitsregeln für sogenannte „Random Walks“ herleiten. Man geht dabei schrittweise von einer Elektrode aus und findet einen maximal großen um den Startpunkt zentrierten Würfel, dessen Innenraum keine Elektrode enthält. Der Startpunkt für den nächsten Schritt liegt immer auf der Oberfläche des vorigen Würfels. Beendet wird der Random Walk wenn eine andere Elektrode erreicht wird. Durch gewichtete Summierung kann man die Kapazitäten zwischen Startelektrode und allen anderen Leitern ermitteln.

Die Methode hat einen geringen Rechenaufwand und es ist damit möglich, sehr große Simulationsgebiete mit geringem Speicherbedarf zu berechnen. Natürlich stehen wie bei jedem

statistischen Verfahren Rechenaufwand und Genauigkeit in direktem Zusammenhang. Typischerweise kann ein maximaler Fehler im Bereich von 5–10% problemlos erreicht werden, für sehr hohe Genauigkeiten steigt der Bedarf an CPU Zeit quadratisch mit dem Kehrwert des Fehlers an, während etwa bei der BEM nur ein linearer Anstieg beobachtbar ist [110].

3.6 Zusammenfassung der Feldberechnungsmethoden

In den folgenden Absätzen soll die Anwendbarkeit der vorhin genannten Methoden zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen im Hinblick auf die in dieser Arbeit behandelten Problemstellungen untersucht werden.

Die Kapazitätsextraktion kann sehr effizient mit der BEM durchgeführt werden, vor allem dann, wenn man eine weitere Beschleunigung mittels Multipolverfahren und näherungsweise Matrixinversion erreichen kann. Ein weiterer Vorteil der BEM ist, dass das elektrische Feld bis ins Unendliche implizit berücksichtigt wird und nicht wie bei den anderen Verfahren ein Fehler durch das begrenzte Simulationsgebiet auftritt. Für die automatische Kapazitätsextraktion auf sehr großen Gebieten (bis zu kompletten Chips) zeichnet sich die Random Walk Methode durch ihren äußerst geringen Speicherbedarf aus. Beide Verfahren scheitern jedoch bei inhomogenen oder nichtlinearen dielektrischen Medien. In diesen Fällen können nur volumenorientierte Methoden wie FDM oder FEM [84, 111, 112] angewendet werden. Auch anisotrope Materialeigenschaften können mit den letztgenannten Verfahren sehr leicht implementiert werden.

Zur Widerstandsextraktion wird am häufigsten die FEM verwendet, da damit einerseits eine gute Genauigkeit erzielt werden kann, andererseits mittels „Articulation Nodes“ und optimierter Eliminationsreihenfolge sowohl die Laufzeit als auch mit dem „Scanline“-Verfahren [80] der Speicherbedarf gering gehalten werden kann. Prinzipiell kann natürlich auch die BEM angewendet werden, praktisch ist ihre Verwendung jedoch auf die Extraktion von Substratwiderständen beschränkt, da in den Leitungen aufgrund der vielen Neumann’schen Rändern keine hohe Effizienz erreicht werden kann. Mittels Finiter Differenzen können Widerstände nur dann genau berechnet werden, wenn die Randflächen der Leitungen parallel zu den Gitterebenen liegen (oder anders ausgedrückt das Gitter geometriekonform ist), da ansonsten eine sehr hohe Gitterdichte notwendig wäre.

Thermische Simulationen können aufgrund der Nichtlinearitäten, die durch die Temperaturabhängigkeit der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit entstehen, nur mit volumenorientierten Verfahren wie FEM [113–115] oder FDM berechnet werden. Randorientierte Methoden wie die BEM scheiden dafür aus.

Transiente Elektrische Simulationen können mit der BEM nur dann gelöst werden, wenn man die Methode mit einem Volumsintegral erweitert, da durch die Formulierung gemäß (2.38) auch Raumladungen auftreten können. Auf das Volumsintegral kann jedoch verzichtet werden, wenn der spezifische Widerstand der Leiter sehr klein ist, sodass man weiterhin annehmen kann, dass die Ladung an der Oberfläche verteilt ist. Voraussetzungen für die BEM sind natürlich homogene und lineare Materialien, anderenfalls muss mit FEM oder FDM diskretisiert werden.

In dieser Arbeit soll zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen ausschließlich die Finite Elemente Methode herangezogen werden. Folgende Kriterien haben zu dieser Auswahl geführt:

- die Fähigkeit nichtlineare und inhomogene Probleme zu lösen,
- die gute numerische Robustheit,
- die Anwendbarkeit auf alle vorkommenden Gleichungstypen und
- die hohe Genauigkeit, die mit dieser Methode erreicht werden kann.

Zum Abschluss sind in Tab. 3.1 einige Eigenschaften der wichtigsten Diskretisierungsverfahren im Überblick dargestellt.

Tabelle 3.1: Vergleich verschiedener Diskretisierungsmethoden (FEM = Finite Elemente Methode, FDM = Finite Differenzen Methode, BEM = Boundary Element Methode)

	Strukturiertes Gitter	Unstrukturiertes Gitter	Simulationsgebiet ∞	Nichtlinearitäten	Inhomogenitäten	Vollbesetzte Systemmatrix	Symmetrische Systemmatrix
FEM	•	•		•	•		•
FDM	•			•	•		
BEM	•	•	•			•	

Kapitel 4

Diskretisierung mit Finiten Elementen

Die Methode der Finiten Elemente wurde ursprünglich zur ingenieurmäßigen Berechnung mechanischer Probleme Anfang der 40er Jahre entwickelt. Die konsequente Weiterentwicklung der Methode führte zu einer allgemein verwendbaren Diskretisierungsmethode für partielle Differentialgleichungen im Kontinuum.

4.1 Grundlagen

Die im vorhergehenden Kapitel aufgestellten partiellen Differentialgleichungen und Randbedingungen können allgemein angeschrieben werden mit u als der unbekanntenen Lösung:

$$\nabla(\underline{\mathbf{m}}\nabla u) = -f, \quad (4.1)$$

$$u|_{\Gamma_1} = g, \quad (4.2)$$

$$\underline{\mathbf{m}}\nabla u \cdot \underline{\mathbf{n}}|_{\Gamma_2} = q, \quad (4.3)$$

$$\Gamma_1 \cup \Gamma_2 = \Gamma(\Omega), \quad (4.4)$$

Dabei ist $\underline{\mathbf{m}}(x, y, z)$ ein symmetrischer positiv definiten 3×3 -Tensor, $f(x, y, z)$ wird Quellendichtefunktion genannt. Sowohl f als auch $\underline{\mathbf{m}}$ sollen auf Ω zumindest stückweise stetig und begrenzt sein. Mit (4.2) und (4.3) wird die Einhaltung der Dirichlet- bzw. Neumann-Bedingungen gefordert.

Zur näherungsweisen Lösung der Gleichung wird nun das Simulationsgebiet Ω in M (geometrisch möglichst einfache) Elemente E_i unterteilt (z.B. Tetraeder, Würfel, Dreiecke), sodass einerseits zwischen den Elementen keine Leerräume vorhanden sind, andererseits sich die Elemente aber auch nicht überlappen:

$$\bigcup_{i=1}^M E_i = \Omega \quad \text{und} \quad \forall i \neq j: \text{Int}(E_i) \cap \text{Int}(E_j) = \emptyset. \quad (4.5)$$

Dabei wird mit $\text{Int}(E_i)$ die Menge aller Punkte des Elements E_i , ausgenommen jener die am Rand des Elementes liegen, bezeichnet.

Weiters wird Randkonformität benachbarter Elemente gefordert. Darunter versteht man, dass an jeder Fläche eines Elements im Inneren des Gitters genau ein Nachbarelement angrenzt.

Man versucht nun, die gesuchte Funktion u durch eine Näherungslösung \tilde{u} zu approximieren, die folgendermaßen aufgebaut ist:

$$\tilde{u}(x, y, z) = \sum_{j=1}^N u_j N_j(x, y, z) = \{u\}^T \{N\}. \quad (4.6)$$

Die Summierung erfolgt über alle Knotenpunkte des Gitters.¹ Dabei wird mit u_j der jeweilige Funktionswert am Knoten mit der Nummer j bezeichnet und $N_j(x, y, z)$ sind die sogenannten Ansatzfunktionen. Diese sind im Prinzip frei wählbar, müssen aber folgende Anforderung erfüllen:

- Die Ansatzfunktionen müssen Interpolationseigenschaft besitzen. Darunter versteht man, dass jede Ansatzfunktion N_j auf dem Knoten j (mit den Koordinaten \mathbf{p}_j) einen Wert von genau 1 hat und 0 auf allen anderen Gitterknoten ($\forall i, j = 1 \dots N | N_j(\mathbf{p}_i) = \delta_{i,j}$).
- Sie müssen derart aufgebaut sein, dass jede Lösung $u(x, y, z)$ der partiellen Differentialgleichung mit einem Fehler, der gegen Null geht, darstellbar ist, indem man N gegen ∞ gehen lässt.

In der Praxis verwendet man dazu meist lineare Funktionen oder Polynome niedriger Ordnung. Die Nummerierung der Knoten soll nun so erfolgen, dass die Knoten an Dirichlet-Rändern (wo also die Lösung u bereits bekannt ist) am Ende gereiht werden. Jene Knoten, für die die Lösung berechnet werden muss, erhalten deshalb die Indizes $j = 1 \dots N_A$, die N_D Knoten an Dirichlet-Rändern werden mit $j = N_A + 1 \dots N$ nummeriert ($N_A + N_D = N$).

Damit wäre das Grundgerüst der Finite Elemente Methode gegeben, man braucht jetzt „nur mehr“ die unbekanntenen Koeffizienten u_i zu bestimmen. Dazu gibt es zwei verschiedenen Ansätze, nämlich das *Verfahren von Ritz* (oder auch Rayleigh-Ritz-Methode genannt) und die *Methode der gewichteten Residuen*.

4.2 Das Verfahren von Ritz

Über einen Variationsansatz erhält man eine integrale Formulierung der partiellen Differentialgleichung². Man erhält die Lösung von (4.1) unter den Randbedingungen (4.2) und (4.3), indem man das Funktional

$$F(u) = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla u) \underline{\mathbf{m}} (\nabla u) \, d\Omega + \int_{\Omega} f u \, d\Omega + \oint_{\Gamma_2} q u \, dA, \quad \frac{\partial}{\partial u} F = 0 \quad (4.7)$$

stationär werden lässt unter der Nebenbedingung

$$u|_{\Gamma_1} = g, \quad (4.8)$$

die der Randbedingung (4.2) entspricht.

¹Bei der FEM ist man nicht auf den hier getroffenen knotenbasierenden Ansatz beschränkt. Es können beispielsweise auch Ansätze über die Gitterkanten formuliert werden [116].

²Die Variationsformulierung stammt ursprünglich aus der klassischen Mechanik (Lagrange Formalismus).

Beweis: Gegeben sei ein Funktional $F(w)$ mit $w = u + tv$, wobei angenommen wird, dass u die Lösung ist, die das Funktional stationär macht, v sei eine beliebige stetige Funktion und t ein skalarer Faktor. Damit $F(w)$ der Dirichlet-Bedingung (4.8) genügt, muss

$$v|_{\Gamma_1} = 0 \quad (4.9)$$

gelten. Somit lautet das Funktional:

$$F(u + tv) = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} (\nabla u + t\nabla v) \underline{\mathbf{m}} (\nabla u + t\nabla v) \, d\Omega + \int_{\Omega} fu + tfv \, d\Omega + \oint_{\Gamma_2} qu + tqv \, dA. \quad (4.10)$$

Den stationären Punkt findet man nun durch Ableitung nach dem Faktor t .

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \int_{\Omega} [-(\nabla v) \underline{\mathbf{m}} (\nabla u) - t(\nabla v) \underline{\mathbf{m}} (\nabla v) + fv] \, d\Omega + \oint_{\Gamma_2} qv \, dA = 0 \quad (4.11)$$

Mit $t = 0$ hat man mit $w = u$ den stationären Punkt erreicht. Unter Berücksichtigung von

$$\nabla(v \underline{\mathbf{m}} \nabla u) = (\nabla v) \underline{\mathbf{m}} (\nabla u) + v \nabla(\underline{\mathbf{m}} \nabla u) \quad (4.12)$$

und dem Gauß'schen Integralsatz erhält man

$$-\oint_{\Gamma} v \underline{\mathbf{m}} \nabla u \cdot \mathbf{n} \, dA + \int_{\Omega} [v \nabla(\underline{\mathbf{m}} \nabla u) + fv] \, d\Omega + \oint_{\Gamma_2} qv \, dA = 0. \quad (4.13)$$

Da v auf Γ_1 verschwindet folgt

$$\int_{\Omega} v [\nabla(\underline{\mathbf{m}} \nabla u) + f] \, d\Omega - \oint_{\Gamma_2} v (\underline{\mathbf{m}} \nabla u \cdot \mathbf{n} - q) \, dA = 0. \quad (4.14)$$

Obige Gleichung ist für beliebiges v gültig und es muss deshalb gemäß dem Fundamentallemma der Variationsrechnung

$$\nabla(\underline{\mathbf{m}} \nabla u) = -f \quad (4.15)$$

auf dem Gebiet Ω und

$$\underline{\mathbf{m}} \nabla u \cdot \mathbf{n} = q \quad (4.16)$$

am Rand Γ_2 gelten. Die Einhaltung der Dirichlet-Bedingung wurde ja bereits in (4.8) gefordert, es handelt sich dabei um eine *wesentliche Randbedingung*, die bereits im Ansatz erfüllt sein muss.

Nach Ritz findet man eine Näherungslösung \tilde{u} , indem man das Funktional (4.7) für \tilde{u} stationär werden lässt, wobei man alle Ableitungen nach den unbekanntem Koeffizienten u_i ($i = 1 \dots N_A$) Null setzt.

$$\forall i = 1 \dots N_A : \frac{\partial F(\tilde{u})}{\partial u_i} = 0 \quad (4.17)$$

Das Bilden der Ableitungen und die Integration wird elementweise durchgeführt und kann oft sogar analytisch vorgenommen werden. Man erhält ein Gleichungssystem der Ordnung N_A , aus dem sich die Unbekannten u_i berechnen lassen.

4.3 Methode der gewichteten Residuen

Man sucht eine Näherungslösung \tilde{u} , sodass das Residuum

$$R_\Omega = \nabla(\underline{\mathbf{m}}\nabla\tilde{u}) + f \quad (4.18)$$

unter Einhaltung der Randbedingungen verschwindet. Ist die Bedingung $R = 0$ im Gebiet Ω erfüllt, dann hat man die Lösung mit $\tilde{u} = u$ erreicht. Da der Funktionsraum der Näherungslösungen \tilde{U} nur eine Teilmenge des Funktionsraums der exakten Lösungen U ist, existiert für den allgemeinen Fall eine solche Lösung nicht. Deshalb versucht man die Residuumsbedingung nicht exakt zu erfüllen, sondern *gewichtet* bzw. gemittelt mit N linear unabhängigen Gewichtsfunktionen (Testfunktionen) W_i , sodass

$$\int_{\Omega} [W_i \nabla(\underline{\mathbf{m}}\nabla\tilde{u}) + W_i f] \, d\Omega = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (4.19)$$

Es liegt nun daran geeignete Gewichtsfunktionen W_i zu wählen, denn von ihnen hängt die Qualität der Lösung ab. Z.B. werden bei der Methode der Kollokation Dirac-Impulse $W_i = \delta(x - x_i)$ verwendet. Eine andere gebräuchliche Methode ist es, die Testfunktionen den Ansatzfunktionen gleichzusetzen $W_i = N_i$. Diese Methode ist auch als *Galerkin-Ansatz* bekannt und soll in dieser Arbeit zur Anwendung kommen.³

Da die Konstruktion von Ansatzfunktionen, die sowohl die Dirichlet- als auch die Neumann-Bedingung exakt erfüllen, sehr schwierig ist, fordert man, dass lediglich die Dirichlet-Bedingung eingehalten wird. Damit auch die Neumann-Bedingung näherungsweise erfüllt ist, berücksichtigt man zusätzlich zum Gebietsresiduum R_Ω noch ein Randresiduum R_Γ

$$R_\Gamma = \sum_{j=1}^N u_j \underline{\mathbf{n}} \underline{\mathbf{m}} \nabla N_j - q, \quad (4.20)$$

welches mit den Gewichtsfunktionen \overline{W}_i gewichtet wird, die im Prinzip völlig unabhängig von den W_i gewählt werden können. Die unbekannten Koeffizienten der Näherungslösung u_i bestimmt man dann aus der Forderung

$$\sum_{j=1}^N u_j \int_{\Omega} W_i \nabla(\underline{\mathbf{m}}\nabla N_j) \, d\Omega + \int_{\Omega} W_i f \, d\Omega + \sum_{j=1}^N u_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_i \underline{\mathbf{n}} \underline{\mathbf{m}} \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_i q \, dA = 0. \quad (4.21)$$

Hierbei ist anzumerken, dass das Randresiduum über den gesamten Rand des Gebietes ($\Gamma_1 \cup \Gamma_2$) gebildet wird—im Gegensatz zum klassischen Ansatz, wo lediglich über Γ_2 integriert wird. Die Dirichlet-Bedingung auf Γ_1 wird hier formal völlig analog zur Neumann-Bedingung auf Γ_2 behandelt, allerdings mit einer vorerst noch unbekanntem Konormalableitung q . Durch diese Vorgehensweise erhält man zwar zunächst ein größeres Gleichungssystem (Rang N , im Gegensatz zu N_A beim klassischen Ansatz), hat dafür aber später die Möglichkeit eine Näherungslösung

³Das Ritz'sche Verfahren und die Methode der gewichteten Residuen mit Galerkin-Ansatz liefern für die hier behandelten partiellen Differentialgleichungen exakt die gleiche Lösung. Die Methode der gewichteten Residuen ist dabei das allgemeinere Verfahren, mit dem zu jedem Variationsansatz eine äquivalente Formulierung gefunden werden kann (aber nicht umgekehrt).

für q auf Γ_1 relativ einfach berechnen zu können. Diese Eigenschaft kann beispielsweise bei der Berechnung elektrostatischer Felder dazu genutzt werden, um die auf den Elektroden vorhandene Ladung zu ermitteln, ohne dass dafür eigens der Gradient des Potentials berechnet werden muss.

Im Folgenden werden die Gleichungen gemäß der Methode der gewichteten Residuen für die Feldberechnung in Isolatoren und Leitern, der Berechnung des transienten elektrischen Feldes und der Wärmeleitungsgleichung angeschrieben.

Anmerkung zur Notation: Die Gleichungen werden nun speziell für das elektrische Potential φ und die Temperatur T aufgestellt. Anstelle der Materialkonstanten \underline{m} tritt entweder die Permittivität $\underline{\epsilon}$, die elektrische Leitfähigkeit γ , bzw. die thermische Leitfähigkeit γ_T . Bei Formeln mit allgemeiner Gültigkeit werden weiterhin die Buchstaben u und \underline{m} verwendet.

Elektrostatisches Feld

Für die Lösung der Gleichung des elektrischen Potentials in anisotropen Dielektrika (2.16) mit den Randbedingungen (2.17) und (2.18) bzw. allgemein mit (2.19) erhält man die Koeffizienten φ_i aus

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} W_j \nabla(\underline{\epsilon} \nabla N_j) \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \varphi_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_j \underline{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_j \sigma \, dA = 0. \quad (4.22)$$

Mit (4.12) (partielle Integration) und Gauß'schem Integralsatz erhält man eine sogenannte *schwache Form*, mit reduzierter Ordnung des Differentialoperators

$$\begin{aligned} - \sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla W_j) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \varphi_j \oint_{\Gamma} W_j \underline{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA + \\ + \sum_{j=1}^N \varphi_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_j \underline{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_j \sigma \, dA = 0. \end{aligned} \quad (4.23)$$

Durch Wahl der Gewichtsfunktionen des Randresiduums mit

$$\overline{W}_j = -W_j \quad (4.24)$$

verschwinden die beiden Randintegrale mit den Konormalableitungen. Gemäß dem Galerkin-Verfahren werden die Gewichtsfunktionen den Ansatzfunktionen gleichgesetzt

$$W_j = N_j, \quad (4.25)$$

wodurch sich (4.23) zu

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla N_j) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega = \oint_{\Gamma} N_j \sigma \, dA \quad (4.26)$$

vereinfacht. Für die Ladungsverteilung σ wird folgender Ansatz getroffen

$$\sigma = \sum_{j=1}^N \sigma_j N_j \quad (4.27)$$

und man erhält somit das Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla N_i) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega = \sum_{j=1}^N \sigma_j \oint_{\Gamma} N_i N_j \, dA. \quad (4.28)$$

Leistungsströme

Für die Berechnung der Potenzialverteilung in elektrischen Leitern ist ebenfalls die Laplace-Gleichung (2.27) mit den Randbedingungen (2.29) und (2.30) zu lösen. Hier wird völlig analog zum elektrostatischen Fall vorgegangen und erhält zur Berechnung der unbekanntenen Koeffizienten φ_j das Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla N_i) \gamma (\nabla N_j) \, d\Omega = \sum_{j=1}^N J_j \oint_{\Gamma} N_i N_j \, dA. \quad (4.29)$$

Elektro-quasistatische Feldberechnung

Für die Berechnung des transienten Verhaltens des elektrischen Potentials gilt es (2.38) zu lösen, die auch folgendermaßen angeschrieben werden kann:

$$\operatorname{div}(\gamma \operatorname{grad} \varphi) = -\operatorname{div}(\underline{\epsilon} \operatorname{grad} \dot{\varphi}) \quad (4.30)$$

wobei mit $\dot{\varphi} = \frac{\partial \varphi}{\partial t}$ die Ableitung des Potentials nach der Zeit bezeichnet wird. Die Randbedingungen lauten gemäß (2.17) und (2.39)

$$\varphi|_{\Gamma_1} = g \quad (4.31)$$

und

$$\gamma \operatorname{grad} \varphi \cdot \mathbf{n}|_{\Gamma_2} = J - \dot{\sigma}. \quad (4.32)$$

Dabei soll die Ladungsdichte am Rand durch

$$\sigma = \mathbf{n} \underline{\epsilon} \nabla \varphi \quad (4.33)$$

ausgedrückt werden.

Mit dem Verfahren der gewichteten Residuen werden hier lediglich die räumlichen Ableitungen des Differentialoperators diskretisiert—die Zeit bleibt hier noch kontinuierlich. Man erhält somit folgenden Ansatz zur Berechnung der Näherungslösung

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} W_i \nabla(\gamma \nabla N_j) \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \int_{\Omega} W_i \nabla(\underline{\epsilon} \nabla N_j) \, d\Omega + \\ & + \sum_{j=1}^N \varphi_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_i \mathbf{n} \gamma \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_i J \, dA + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \oint_{\Gamma} W_i \mathbf{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Mittels partieller Integration erhält man wiederum die schwache Form

$$\begin{aligned} & - \sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla W_i) \gamma (\nabla N_j) \, d\Omega - \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \int_{\Omega} (\nabla W_i) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \varphi_j \oint_{\Gamma} W_i \mathbf{n} \gamma \nabla N_j \, dA + \\ & + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \oint_{\Gamma} W_i \mathbf{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_i \mathbf{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_i J \, dA + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \oint_{\Gamma} W_i \mathbf{n} \underline{\epsilon} \nabla N_j \, dA = 0. \end{aligned} \quad (4.35)$$

Für die Gewichtsfunktionen am Rand wird wieder $\overline{W}_i = -W_i$ angenommen. Weiters gilt gemäß dem Galerkin-Ansatz $W_i = N_i$. Für die Normalkomponente der Stromdichte am Rand wird die folgende Näherung verwendet:

$$J = \sum_{j=1}^N J_j N_j . \quad (4.36)$$

Man erhält somit die folgende Gleichung zur Bestimmung der unbekanntenen Koeffizienten:

$$\sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla N_i) \gamma (\nabla N_j) \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \dot{\varphi}_j \int_{\Omega} (\nabla N_i) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega = \sum_{j=1}^N J_j \oint_{\Gamma} N_i N_j \, dA \quad (4.37)$$

Wärmeleitung stationär

Für die stationäre Wärmeleitungsgleichung (2.44) mit den Randbedingungen (2.51) und (2.53) wird

$$\sum_{j=1}^N T_j \int_{\Omega} W_i \nabla (\gamma_T \nabla N_j) \, d\Omega + \int_{\Omega} W_i p \, d\Omega + \sum_{j=1}^N T_j \oint_{\Gamma} \overline{W}_i \gamma_T \nabla N_j \, dA - \oint_{\Gamma} \overline{W}_i \Theta \, dA \quad (4.38)$$

Mittels schwacher Formulierung und Wahl der Gewichtsfunktionen analog zu den elektrischen Systemen erhält man das Gleichungssystem

$$\sum_{j=1}^N T_j \oint_{\Gamma} (\nabla N_i) \gamma_T (\nabla N_j) \, dA = \sum_{j=1}^N p_j \int_{\Omega} N_i N_j \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \Theta_j \oint_{\Gamma} N_i N_j \, dA \quad (4.39)$$

Wärmeleitung transient

Für die Lösung der transienten Wärmeleitungsgleichung (2.43) mit den Randbedingungen wie in (2.51) und (2.53) gilt analog

$$\sum_{j=1}^N T_j \oint_{\Gamma} (\nabla N_i) \gamma_T (\nabla N_j) \, dA + \sum_{j=1}^N \dot{T}_j \int_{\Omega} N_i N_j \rho_m c_p \, d\Omega = \sum_{j=1}^N p_j \int_{\Omega} N_i N_j \, d\Omega + \sum_{j=1}^N \Theta_j \oint_{\Gamma} N_i N_j \, dA . \quad (4.40)$$

4.4 Elementformulierung

Für die Berechnung der Näherungslösung müssen Volumsintegrale über das gesamte Simulationsgebiet Ω und über den Rand Γ gelöst werden. Die Volumsintegrale über Ω können als Summe der Anteile der einzelnen Elemente angeschrieben werden.

$$I = \sum_{i=1}^M I^{e_i} \quad (4.41)$$

Als Gitterelemente sollen hier ausschließlich Tetraeder verwendet werden, außer natürlich für die Beschreibung des Randes des Simulationsgebietes (zur Vorgabe von Randbedingungen) — hier

werden Dreiecke verwendet, die konform zu den an den Rand grenzenden Tetraederflächen sind. Für zweidimensionale Simulationen werden stattdessen Dreiecke und Linienelemente verwendet. Die ausführliche Behandlung dieser Elemente soll jedoch im Rahmen dieser Arbeit nicht erfolgen, da sie völlig analog zum dreidimensionalen Fall durchgeführt werden kann.

Prinzipiell ist man bei der Finiten Elemente Methode nicht auf Tetraeder bzw. Dreiecke beschränkt. Ebenso können beispielsweise Hexaeder, Prismen oder Oktaeder verwendet werden. Auch Gitter mit gemischten Elementtypen sind möglich.

Koordinatentransformation

Da die Integration über ein Element für Tetraeder und Dreiecke meist analytisch durchführbar ist, soll sie im lokalen Elementkoordinatensystem (ξ, η, ζ) erfolgen. Der Integrand muss dafür vom (x, y, z) - ins (ξ, η, ζ) -Koordinatensystem transformiert werden (siehe Abbildungen 4.1 und 4.2).

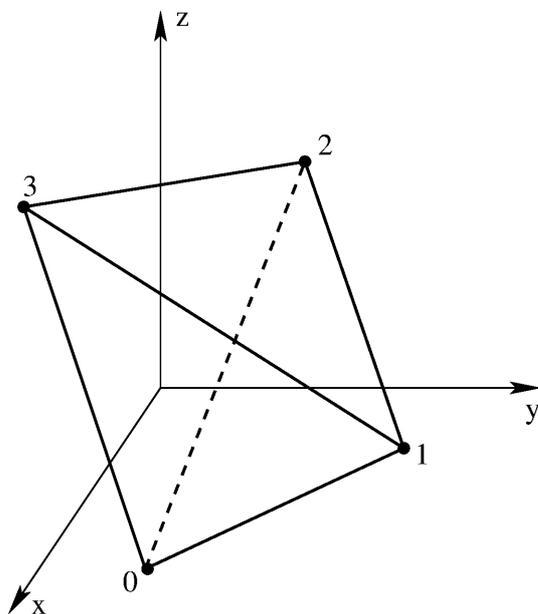


Abbildung 4.1: Allgemeines Tetraederelement im (x, y, z) -Koordinatensystem

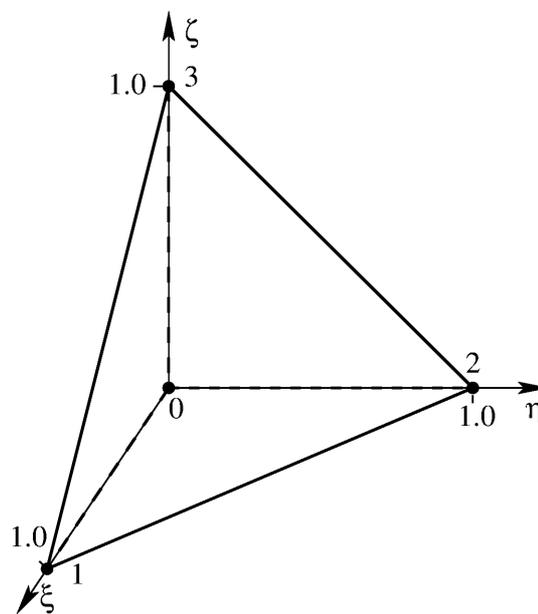


Abbildung 4.2: Tetraederelement im normierten (ξ, η, ζ) -Koordinatensystem

Mit folgender Abbildungsvorschrift kann von lokalen Elementkoordinaten ins globale Koordinatensystem umgerechnet werden

$$\begin{aligned} x &= x_0 + (x_1 - x_0)\xi + (x_2 - x_0)\eta + (x_3 - x_0)\zeta \\ y &= y_0 + (y_1 - y_0)\xi + (y_2 - y_0)\eta + (y_3 - y_0)\zeta \\ z &= z_0 + (z_1 - z_0)\xi + (z_2 - z_0)\eta + (z_3 - z_0)\zeta \end{aligned} \quad (4.42)$$

bzw. in Matrixschreibweise

$$\{r\} = \{r_0\} + [J] \cdot \{\delta\} \quad (4.43)$$

oder für die Umrechnung von globalen in lokale Koordinaten

$$\{\delta\} = [J]^{-1}(\{r\} - \{r_0\}) \quad (4.44)$$

mit der sogenannten Jakobi-Matrix

$$[J] = \begin{pmatrix} x_1 - x_0 & x_2 - x_0 & x_3 - x_0 \\ y_1 - y_0 & y_2 - y_0 & y_3 - y_0 \\ z_1 - z_0 & z_2 - z_0 & z_3 - z_0 \end{pmatrix} \quad (4.45)$$

sowie $\{r\} = (x, y, z)^T$ und $\{\delta\} = (\xi, \eta, \zeta)^T$.

Ansatzfunktionen

Die Näherungslösung \tilde{u} wird gemäß (4.6) als Linearkombination der Ansatzfunktionen N_j dargestellt. Für eine Behandlung mit der Methode der gewichteten Residuen müssen die Ansatzfunktionen am Übergang von einem Element zum Nachbarelement zumindest stetig sein und innerhalb eines Elements zumindest einmal stetig differenzierbar sein. Die Ansatzfunktionen $N_k^e(\xi, \eta, \zeta)$ werden nun lokal auf dem Einheitstetraeder definiert. Dabei ist anzumerken, dass sich die globale Ansatzfunktion $N_j(x, y, z)$ aus den lokalen Ansatzfunktionen der am Knoten j angrenzenden Tetraederelemente zusammensetzt. Die einfachste Art von Ansatzfunktionen sind lineare Funktionen, die für den Einheitstetraeder wie folgt gegeben sind:

$$\begin{aligned} N_{L0}^e &= 1 - \xi - \eta - \zeta \\ N_{L1}^e &= \xi \\ N_{L2}^e &= \eta \\ N_{L3}^e &= \zeta \end{aligned} \quad (4.46)$$

Um eine beliebig quadratische Funktion im dreidimensionalen Raum anzugeben benötigt man zehn Parameter, daher benötigen Tetraederelemente mit quadratischem Ansatz auch zehn Stützpunkte. Man wählt deshalb außer den vier Eckpunkten des Tetraeders zusätzlich noch sechs Punkte, die jeweils in der Mitte der Kanten liegen.

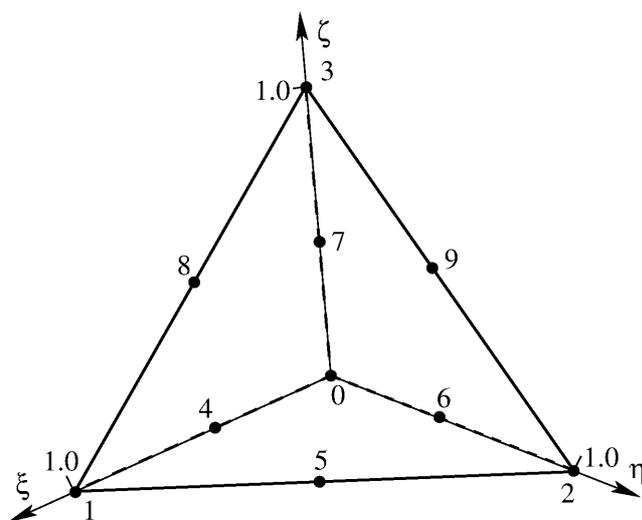


Abbildung 4.3: Knotennummerierung bei einem Tetraeder mit quadratischen Ansatzfunktionen

Die quadratischen Ansatzfunktionen im Einheitstetraeder lassen sich durch die linearen ausdrücken:

$$\begin{aligned}
 N_{Q_0}^e &= N_{L_0}^e(2N_{L_0}^e - 1) \\
 N_{Q_1}^e &= N_{L_1}^e(2N_{L_1}^e - 1) \\
 N_{Q_2}^e &= N_{L_2}^e(2N_{L_2}^e - 1) \\
 N_{Q_3}^e &= N_{L_3}^e(2N_{L_3}^e - 1) \\
 N_{Q_4}^e &= N_{L_0}^e N_{L_1}^e \\
 N_{Q_5}^e &= N_{L_1}^e N_{L_2}^e \\
 N_{Q_6}^e &= N_{L_0}^e N_{L_2}^e \\
 N_{Q_7}^e &= N_{L_0}^e N_{L_3}^e \\
 N_{Q_8}^e &= N_{L_1}^e N_{L_3}^e \\
 N_{Q_9}^e &= N_{L_2}^e N_{L_3}^e
 \end{aligned} \tag{4.47}$$

In Abb. 4.4 sind die Ansatzfunktionen auf Einheitstetraedern in Form von Isoflächen dargestellt. Dabei entspricht die Farbe Blau einem Wert von Null und Rot einem Wert von eins. Hier fällt auf, dass die Funktionen $N_{Q_0}^e$ bis $N_{Q_3}^e$ auch negativ werden (Bereich zwischen den beiden dunkelblauen Isoflächen).

Zu jedem Elementknoten k gibt es genau eine Ansatzfunktion N_k^e , die an diesem Knoten gleich 1 ist und 0 auf allen anderen. Für die Summe aller Ansatzfunktionen gilt

$$\sum_{k=0}^{nl-1} N_k^e(\xi, \eta, \zeta) = 1 \tag{4.48}$$

Im Folgenden sollen die Integrale über Ω und Γ auf einem einzelnen Gitterelement gelöst werden, indem das Integral in das lokale Elementkoordinatensystem transformiert wird und dort nach einer analytischen Lösung gesucht wird.

Elementintegral für den Laplace-Term

Für ein einzelnes Element E sieht das Integral für den Term

$$I_L^e = \int_E (\nabla N_i) \underline{\mathbf{m}} (\nabla N_j) \, dx \, dy \, dz \tag{4.49}$$

folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}
 I_L^e = \int_E \left[m_{11} \frac{\partial N_k^e}{\partial x} \frac{\partial N_l^e}{\partial x} + m_{22} \frac{\partial N_k^e}{\partial y} \frac{\partial N_l^e}{\partial y} + m_{33} \frac{\partial N_k^e}{\partial z} \frac{\partial N_l^e}{\partial z} \right. \\
 \left. + 2m_{12} \frac{\partial N_k^e}{\partial x} \frac{\partial N_l^e}{\partial y} + 2m_{13} \frac{\partial N_k^e}{\partial x} \frac{\partial N_l^e}{\partial z} + 2m_{23} \frac{\partial N_k^e}{\partial y} \frac{\partial N_l^e}{\partial z} \right] dx \, dy \, dz \tag{4.50}
 \end{aligned}$$

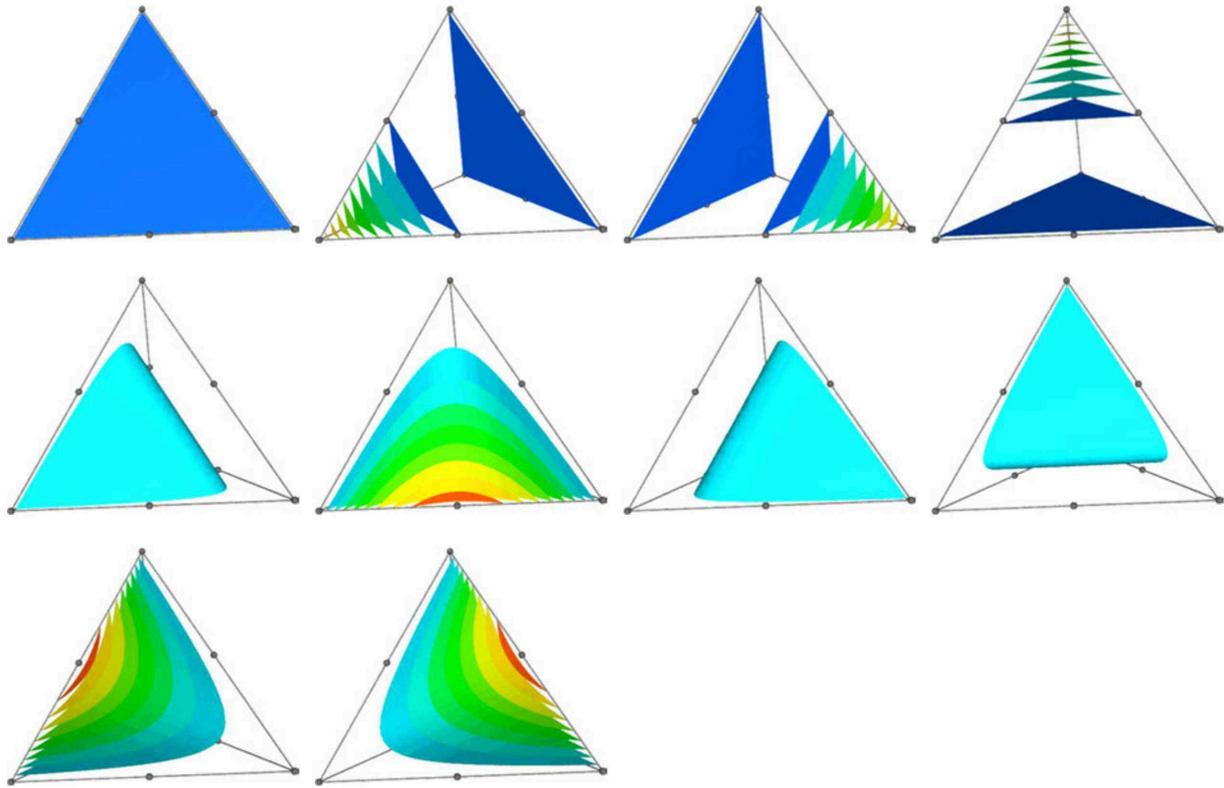


Abbildung 4.4: Isoflächendarstellung der quadratischen Ansatzfunktionen $N_{Q_0}^e \dots N_{Q_9}^e$ (in dieser Reihenfolge) auf einem Tetraederelement. Jede der Ansatzfunktionen hat auf genau einem Knoten einen Wert von 1 und 0 auf allen anderen.

Das Integral kann nun auf das lokale (ξ, η, ζ) -Koordinatensystem im Element transformiert werden.

$$\begin{aligned}
 I_L^e = \int_E & \left[m_{11} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) \right. \\
 & + m_{22} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) \\
 & + m_{33} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \right) \\
 & + 2m_{12} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) \\
 & + 2m_{13} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial x} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \right) \\
 & \left. + 2m_{23} \left(\frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial y} \right) \left(\frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial z} + \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} \frac{\partial \zeta}{\partial z} \right) \right] \det[J] \, d\xi \, d\eta \, d\zeta
 \end{aligned} \tag{4.51}$$

Man kann nun den Integrand nach den darin auftretenden Ableitungen im lokalen Koordinatensystem zusammenfassen und erhält

$$I_L^e = \int_E \left(g_0 \frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} + g_1 \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} + g_2 \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} + 2g_3 \frac{\partial N_k^e}{\partial \xi} \frac{\partial N_l^e}{\partial \eta} + 2g_4 \frac{\partial N_k^e}{\partial \eta} \frac{\partial N_l^e}{\partial \zeta} + 2g_5 \frac{\partial N_k^e}{\partial \zeta} \frac{\partial N_l^e}{\partial \xi} \right) d\xi d\eta d\zeta \quad (4.52)$$

Zur Vereinfachung definiert man die Matrix $[K]$ als $[K] = \det[J] \cdot [J]^{-1}$, setzt ihre Elemente in (4.51) ein und erhält somit für die Faktoren g_0 bis g_5

$$\begin{aligned} g_0 &= (m_{11}K_{11}^2 + m_{22}K_{21}^2 + m_{33}K_{31}^2 + 2m_{12}K_{11}K_{21} + 2m_{23}K_{21}K_{31} + 2m_{13}K_{31}K_{11}) / \det[J] \\ g_1 &= (m_{11}K_{12}^2 + m_{22}K_{22}^2 + m_{33}K_{32}^2 + 2m_{12}K_{12}K_{22} + 2m_{23}K_{22}K_{32} + 2m_{13}K_{32}K_{12}) / \det[J] \\ g_2 &= (m_{11}K_{13}^2 + m_{22}K_{23}^2 + m_{33}K_{33}^2 + 2m_{12}K_{13}K_{23} + 2m_{23}K_{23}K_{33} + 2m_{13}K_{33}K_{13}) / \det[J] \\ g_3 &= (m_{11}K_{11}K_{12} + m_{22}K_{21}K_{22} + m_{33}K_{31}K_{32} + m_{12}(K_{11}K_{22} + K_{12}K_{21}) \\ &\quad + m_{23}(K_{21}K_{32} + K_{22}K_{31}) + m_{13}(K_{31}K_{12} + K_{32}K_{11})) / \det[J] \\ g_4 &= (m_{11}K_{12}K_{13} + m_{22}K_{22}K_{23} + m_{33}K_{32}K_{33} + m_{12}(K_{12}K_{23} + K_{13}K_{22}) \\ &\quad + m_{23}(K_{22}K_{33} + K_{23}K_{32}) + m_{13}(K_{32}K_{13} + K_{33}K_{12})) / \det[J] \\ g_5 &= (m_{11}K_{13}K_{11} + m_{22}K_{23}K_{21} + m_{33}K_{33}K_{31} + m_{12}(K_{13}K_{21} + K_{11}K_{23}) \\ &\quad + m_{23}(K_{23}K_{31} + K_{21}K_{33}) + m_{13}(K_{33}K_{11} + K_{31}K_{13})) / \det[J] \end{aligned} \quad (4.53)$$

Für elementweise konstantes \underline{m} sind auch die sechs Koeffizienten $g_0 \dots g_5$ auf dem gesamten Gitterelement konstant, sie sind lediglich von der Lage des Elements im globalen Koordinatensystem (x, y, z) und den Komponenten des Tensors \underline{m} abhängig.

Für isotrope Medien gilt $m_{11} = m_{22} = m_{33} = m$ und $m_{12} = m_{23} = m_{13} = 0$. Die Koeffizienten lassen sich dadurch vereinfachen:

$$\begin{aligned} g_0 &= m(K_{11}^2 + K_{21}^2 + K_{31}^2) / \det[J] \\ g_1 &= m(K_{12}^2 + K_{22}^2 + K_{32}^2) / \det[J] \\ g_2 &= m(K_{13}^2 + K_{23}^2 + K_{33}^2) / \det[J] \\ g_3 &= m(K_{11}K_{12} + K_{21}K_{22} + K_{31}K_{32}) / \det[J] \\ g_4 &= m(K_{12}K_{13} + K_{22}K_{23} + K_{32}K_{33}) / \det[J] \\ g_5 &= m(K_{13}K_{11} + K_{23}K_{21} + K_{33}K_{31}) / \det[J] \end{aligned} \quad (4.54)$$

Das Integral (4.52) kann nun in sechs Integrale über die einzelnen Terme aufgespalten und die Faktoren $g_0 \dots g_5$ vor diese Integrale gehoben werden. Die einzelnen Integranden bestehen jetzt nur mehr aus Produkten der Ableitungen der Ansatzfunktionen im lokalen Elementkoordinatensystem und können analytisch berechnet werden.⁴ Diese Integrationen brauchen für alle Gitterelemente nur einmal ausgeführt werden. Für die praktische Anwendung berechnet man

⁴Eine analytische Lösung in dieser Form ist nur dann möglich wenn die Faktoren $g_0 \dots g_5$ über das gesamte Element konstant sind. Das ist genau dann der Fall, wenn das Element eine konstante Jakobi-Determinante besitzt (ist bei den hier verwendeten Tetraederelementen immer erfüllt) und der Materialfaktor \underline{m} im Element ebenfalls konstant ist. Anderenfalls muss für die Integration eine numerische Approximation verwendet werden.

sie für alle Paarungen (k, l) von Ansatzfunktionen eines Elements und speichert sie in Matrizen (den sogenannten Elementmatrizen) die wie folgt gebildet werden:

$$\begin{aligned}
 [A_{L0}^e] &= \int_E \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\}^T d\xi d\eta d\zeta \\
 [A_{L1}^e] &= \int_E \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\}^T d\xi d\eta d\zeta \\
 [A_{L2}^e] &= \int_E \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\}^T d\xi d\eta d\zeta \\
 [A_{L3}^e] &= \int_E \left[\left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\}^T + \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\}^T \right] d\xi d\eta d\zeta \\
 [A_{L4}^e] &= \int_E \left[\left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\}^T + \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \eta} \right\}^T \right] d\xi d\eta d\zeta \\
 [A_{L5}^e] &= \int_E \left[\left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\}^T + \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \xi} \right\} \cdot \left\{ \frac{\partial N^e}{\partial \zeta} \right\}^T \right] d\xi d\eta d\zeta
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

Die sechs Elementmatrizen $A_{L0}^e \dots A_{L5}^e$ können nun zu einer gesamten Elementmatrix A_L^e aufsummiert werden. Da jede der Elementmatrizen symmetrisch ist, hat natürlich auch die gesamte Elementmatrix Symmetrieeigenschaft.

$$[A_L^e] = g_0[A_{L0}^e] + g_1[A_{L1}^e] + g_2[A_{L2}^e] + g_3[A_{L3}^e] + g_4[A_{L4}^e] + g_5[A_{L5}^e] \tag{4.56}$$

Dabei sind die Einträge der gesamten Elementmatrix $[A_L^e]$ die Lösungen von (4.49) für alle Kombinationen von lokalen Ansatzfunktionen.

Elementintegral für den Poisson-Term

Das Integral

$$I_P^e = \int_E N_i N_j dx dy dz \tag{4.57}$$

wird zuerst ins Elementkoordinatensystem (ξ, η, ζ) transformiert

$$I_P^e = \int_E N_k^e N_l^e \det[J] d\xi d\eta d\zeta \tag{4.58}$$

und kann dann analytisch gelöst werden, indem die Jakobi-Determinante vor das Integral gehoben wird.⁵ Man kann nun für alle Paarungen der lokalen Ansatzfunktionen eine entsprechende Elementmatrix aufstellen

$$[A_{P0}^e] = \int_E \{N^e\} \cdot \{N^e\}^T d\xi d\eta d\zeta, \tag{4.59}$$

⁵Voraussetzung dafür ist wieder, dass die Jakobi-Determinante über das gesamte Element konstant ist.

die ausschließlich von den Ansatzfunktionen abhängig ist und für alle Elemente nur ein einziges Mal berechnet werden muss. Die Matrix

$$[A_P^e] = \det[J] \cdot [A_{P_0}^e] \quad (4.60)$$

enthält dann die Lösungen von (4.57) für alle Kombinationen von lokalen Ansatzfunktionen.

Elementintegral am Rand

Das Integral über die Oberfläche des Gebiets Ω kann als Summe der Anteile der Randelemente aufgefasst werden.

$$I_B^e = \int_{E_B} N_i N_j \, dA \quad (4.61)$$

Bei einem dreidimensionalen Simulationsbereich mit Tetraedern als Gitterelemente sind die Randelemente Dreiecke. Bei der Koordinatentransformation wird nun ein Punkt auf dem Dreieck mit den globalen Koordinaten (x, y, z) in die normierten Elementkoordinaten (ξ, η) transformiert. Dabei ergibt sich folgende Jakobi-Determinante:

$$\det[J] = |(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_0) \times (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_0)| \quad (4.62)$$

wobei mit $\mathbf{r}_0 \dots \mathbf{r}_2$ die Ortsvektoren der Eckpunkte des Dreiecks bezeichnet werden. Man kann das Integral ebenfalls analytisch lösen⁶

$$[A_B^e] = \det[J] \int_{E_B} \{N^{e_B}\} \cdot \{N^{e_B}\}^T \, d\xi \, d\eta \quad (4.63)$$

wobei $\{N^{e_B}\}$ die entsprechenden Ansatzfunktionen der Randelemente sind, die gemäß (4.46) bzw. (4.47) gegeben sind, wobei für die ζ -Koordinate immer 0 eingesetzt wird.

4.5 Assemblierung

Nachdem nun die einzelnen Integralterme der Gleichungen des Galerkin Ansatzes elementweise bestimmt wurden, sollen nun die Beiträge der Elemente aufsummiert werden, um das Integral über das gesamte Gebiet Ω sowie den Rand Γ zu bilden. Daraus kann ein Gleichungssystem für die unbekanntenen u_i aufgestellt werden.

Elektrostatistisches Feld

Das Gleichungssystem (4.28) kann in Matrixschreibweise angegeben werden

$$[A]\{\varphi\} = \{b\}. \quad (4.64)$$

Dazu berechnet man zunächst die einzelnen Elementmatrizen mittels (4.53) und (4.56), wobei für den Tensor \underline{m} die Permittivität $\underline{\epsilon}$ eingesetzt wird. Die Matrix $[A]$ wird dann durch Summierung über alle Elementmatrizen gebildet

$$[A] = \sum_{m=1}^M [A_L^{e_m}]. \quad (4.65)$$

⁶Eine konstante Jakobi-Determinante ist wieder Voraussetzung, ist aber bei Dreieckselementen immer gegeben.

Diese Gleichung ist allerdings nur symbolisch zu verstehen. Bei dieser Summierung wird nämlich von der lokalen Knotennummerierung auf die globale übergegangen. Hat beispielsweise der erste Knoten eines Elements den globalen Index 17 und der zweite den Index 62, so bedeutet dies, dass das Element (1,2) der Matrix $[A_L^{e_m}]$ an der Position (17,62) in der Matrix $[A]$ addiert wird. Dieser Vorgang wird als Assemblierung bezeichnet.

Gleichermaßen geht man bei der Summierung der Randterme von lokaler auf globale Knotennummerierung über

$$\{b\} = \sum_{m=1}^{M_B} [A_B^{e_m}] \{\sigma\}. \quad (4.66)$$

Die Spaltenmatrix $\{b\}$ ergibt sich als Summe der Beiträge der Elemente am Rand des Simulationsgebietes, kann also nur für Randknoten einen Wert ungleich Null haben. Genauer gesagt, tritt eine Flächenladung σ nur an den Elektroden auf—das sind jene Knoten, die eine Dirichlet-Randbedingung haben. Deshalb können auch nur an diesen Stellen des $\{b\}$ -Vektors Einträge ungleich Null vorhanden sein. Das Gleichungssystem (4.64) kann auch detailliert angeschrieben werden, wobei die obere Hälfte des Gleichungssystems den inneren Knoten und die untere Hälfte den Randknoten auf Γ_1 zugeordnet ist (die unbekanntten Werte sind unterstrichen):

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1,N_A} & a_{1,N_A+1} & \cdots & a_{1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N_A,1} & \cdots & a_{N_A,N_A} & a_{N_A,N_A+1} & \cdots & a_{N_A,N} \\ a_{N_A+1,1} & \cdots & a_{N_A+1,N_A} & a_{N_A+1,N_A+1} & \cdots & a_{N_A+1,N} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N,1} & \cdots & a_{N,N_A} & a_{N,N_A+1} & \cdots & a_{N,N} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \vdots \\ \varphi_{N_A} \\ \varphi_{N_A+1} \\ \vdots \\ \varphi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \underline{b_{N_A+1}} \\ \vdots \\ \underline{b_N} \end{bmatrix} \quad (4.67)$$

oder als Teilmatrizen dargestellt

$$\begin{bmatrix} [A_A] & [A_B] \\ [A_B]^T & [A_D] \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} \{\varphi_A\} \\ \{\varphi_D\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{0\} \\ \{b_D\} \end{Bmatrix} \quad (4.68)$$

Um nun die unbekanntten Potenzialwerte $\{\varphi_A\}$ im Inneren des Leiters zu erhalten, muss man das folgende Gleichungssystem lösen:

$$[A_A] \cdot \{\varphi_A\} = -[A_B] \cdot \{\varphi_D\} \quad (4.69)$$

Die elektrischen Ladungen auf den Elektroden werden berechnet, indem man die Spaltenmatrix $\{b_D\}$ mit der folgenden Gleichung ermittelt:

$$\{b_D\} = [A_B]^T \cdot \{\varphi_A\} + [A_D] \cdot \{\varphi_D\} \quad (4.70)$$

und dann das Gleichungssystem

$$[B]\{\sigma\} = \{b\} \quad (4.71)$$

löst. Die Matrix $[B]$ setzt sich aus den Elementmatrizen der Randelemente, die an den Oberflächen der Elektroden liegen, zusammen:

$$[B] = \sum_{m=1}^{M_B} [A_B^{e_m}]. \quad (4.72)$$

Bei der Summierung muss wieder von der lokalen Knotennummerierung der Elementmatrizen $[A_B^{em}]$ auf die globale Nummerierung übergegangen werden. Nummeriert man die Gitterknoten in einer Reihenfolge, sodass Knoten auf gleichen Elektroden durchlaufende Indizes haben, dann ergibt sich für die Matrix $[B]$ eine Blockstruktur.

$$\begin{bmatrix} [0] & [0] & [0] & [0] \\ [0] & [B_1] & [0] & [0] \\ [0] & [0] & \ddots & [0] \\ [0] & [0] & [0] & [B_n] \end{bmatrix} \cdot \begin{Bmatrix} \{0\} \\ \{\sigma_1\} \\ \vdots \\ \{\sigma_n\} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \{0\} \\ \{b_1\} \\ \vdots \\ \{b_n\} \end{Bmatrix} \quad (4.73)$$

Jeder der n Blöcke kann einer Elektrode zugeordnet werden, und das Gleichungssystem kann nach Elektroden separiert gelöst werden.

Schwebende Randbedingungen erfordern eine spezielle Behandlung, da hier weder das Potenzial der Elektrode noch die Verteilung der Ladung bzw. die entsprechenden Einträge im $\{b\}$ -Vektor bekannt sind. Im Folgenden wird angenommen, die Knoten mit den globalen Indizes $k \dots l$ seien Randknoten einer schwebenden Elektrode. Dann folgt aus (2.20) unmittelbar

$$\varphi_k = \varphi_i = \varphi_l \quad \text{für } k < i < l. \quad (4.74)$$

Aus (4.61) sowie (4.48) lässt sich zeigen

$$\oint_{\Gamma_f} \tilde{\sigma} \, dA = \sum_{j=k}^l \sigma_j \oint_{\Gamma_f} N_j \, dA = \sum_{j=k}^l \sigma_j \sum_{i=k}^l \oint_{\Gamma_f} N_i N_j \, dA = \sum_{i=k}^l b_i. \quad (4.75)$$

Aus (2.21) resultiert somit die Forderung

$$\sum_{i=k}^l b_i = 0. \quad (4.76)$$

Bei der Lösung des Gleichungssystems müssen nun (4.74) und (4.76) als zusätzliche Gleichungen in das System aufgenommen werden, oder man nutzt (4.74) um die Gleichungen k bis l zu eliminieren. Dazu ersetzt man in der Matrix $[A]$ die Zeilen k bis l durch eine einzelne Zeile mit den Spaltensummen der eliminierten Zeilen. Dasselbe wird natürlich auch für die Spalten von $[A]$ durchgeführt. Beim $\{b\}$ -Vektor werden ebenfalls die Zeilen k bis l entfernt und durch eine einzelne Null ersetzt.

Die Feldenergie kann mittels

$$W = \int_{\Omega} \mathbf{E} \underline{\epsilon} \mathbf{E} \, d\Omega = \sum_{i=1}^N \varphi_i \sum_{j=1}^N \varphi_j \int_{\Omega} (\nabla N_i) \underline{\epsilon} (\nabla N_j) \, d\Omega \quad (4.77)$$

berechnet werden und ergibt

$$W = \frac{1}{2} \{\varphi\}^T [A] \{\varphi\} = \frac{1}{2} \{\varphi\}^T \{b\} = \frac{1}{2} \{\varphi_D\}^T \{b_D\}. \quad (4.78)$$

Nimmt man wieder an, dass die Knoten, die zu einer Elektrode gehören, fortlaufend nummeriert sind so kann obige Gleichung in Teilsummen, die den einzelnen Elektroden zugeordnet sind, gegliedert werden

$$W = \varphi_1 \sum_{j=K_1}^{K_2-1} b_j + \varphi_2 \sum_{j=K_2}^{K_3-1} b_j \dots \quad (4.79)$$

Die Potenzialwerte $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ sind auf den Elektroden konstant und wurden deshalb vor die Summe gehoben. Die Summierung über die b_j entspricht gemäß (4.75) der Ladung auf der jeweiligen Elektrode. Die Energie des Feldes entspricht deshalb der Summe der Produkte aus Ladung und Potenzial der einzelnen Elektroden. Für die Kapazitätsberechnung mit Finiten Elementen bedeutet dies, dass die Methode der Ladungsintegration und die Energiemethode völlig äquivalent sind.

Leitungsströme

Die Berechnung der Potenzialverteilung und Stromdichte in elektrischen Leitern kann analog zur Berechnung des Elektrischen Feldes in dielektrischen Materialien erfolgen. Man erhält wieder ein Gleichungssystem der Form

$$[A]\{\varphi\} = \{b\} \quad (4.80)$$

mit

$$[A] = \sum_{m=1}^M [A_L^{e_m}] \quad \text{und} \quad (4.81)$$

$$\{b\} = \sum_{m=1}^{M_B} [A_B^{e_m}]\{J\}. \quad (4.82)$$

Die Berechnung der Elementmatrizen $[A_L^{e_m}]$ erfolgt mit (4.56) und (4.54), wobei für den Materialfaktor \underline{m} die elektrische Leitfähigkeit γ eingesetzt wird. In (4.81) und (4.82) wird wieder bei der Summenbildung von lokalen auf globale Knotennummerierung übergewechselt. Die Matrix $[A]$ kann äquivalent zu (4.68) in die Teilmatrizen $[A_A]$, $[A_B]$, $[A_B]^T$ und $[A_D]$ aufgeteilt werden. Auch die Spaltenmatrix $\{b\}$ wird aufgeteilt in

$$\{b\} = \left\{ \begin{array}{l} \{b_A\} \\ \{b_D\} \end{array} \right\} \quad (4.83)$$

Neumann-Bedingungen zeichnen sich dadurch aus, dass in der Spaltenmatrix $\{b_A\}$, die den entsprechenden Randknoten zuzuordnende Zeilen, von Null verschiedene Einträge haben.

Die unbekanntenen Potenzialwerte $\{\varphi_A\}$ erhält man nun durch Lösen des Gleichungssystems

$$[A_A]\{\varphi_A\} = \{b_A\} - [A_B]\{\varphi_D\}. \quad (4.84)$$

Die **Flächenstromdichte** J auf Dirichlet'schen Rändern kann mit (4.70) bis (4.73) berechnet werden, indem formal σ durch J ersetzt wird.

Für schwebende Randbedingungen gilt für das Potenzial (4.74) und für den Gesamtstrom in Analogie zu (4.76)

$$\sum_{i=k}^l b_i = I_f. \quad (4.85)$$

Diese Bedingungen können, wie zuvor bei der Berechnung des elektrostatischen Feldes, in das Gleichungssystem eingebaut werden, indem man die entsprechenden Zeilen und Spalten zusammenfasst.

Die Verlustleistung ergibt sich als

$$W = \{\varphi\}^T [A] \{\varphi\} = \{\varphi\}^T \{b\} \quad (4.86)$$

Elektro-quasistatische Feldberechnung

Gleichung 4.37 kann in Matrixschreibweise in folgendermaßen angeschrieben werden:

$$[M_1] \{\dot{\varphi}\} = -[M_2] \{\varphi\} + [M_3] \{J\}. \quad (4.87)$$

Die **Zeitdiskretisierung** wird vorgenommen, indem man eine Integration über einen Zeitschritt $\Delta t = t_n - t_{n-1}$ durchführt. (Zwecks Abkürzung wird für das Potenzial $\varphi(t_n)$ zum Zeitschritt t_n einfach φ_n geschrieben.)

$$[M_1] (\{\varphi_n\} - \{\varphi_{n-1}\}) = -[M_2] \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{\varphi\} dt + [M_3] \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{J\} dt \quad (4.88)$$

Zur Lösung dieser Integrale sollen nun zwei verschiedene Näherungsverfahren betrachtet werden, nämlich das *Rückwärts-Euler-Verfahren*, das sich durch numerische Stabilität auszeichnet und die *Trapezmethode*, (oft auch als Crank-Nicolson-Verfahren bezeichnet) mit der im Allgemeinen eine höhere Genauigkeit erreicht werden kann. Beim Rückwärts-Euler-Verfahren wird das Integral über einen Zeitschritt durch die Fläche eines Rechtecks angenähert

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \{\varphi\} dt \approx \Delta t \{\varphi_n\}, \quad (4.89)$$

bei der Trapezmethode hingegen durch die Fläche eines Trapezes

$$\int_{t_{n-1}}^{t_n} \{\varphi\} dt \approx \Delta t \frac{1}{2} (\{\varphi_n\} + \{\varphi_{n-1}\}). \quad (4.90)$$

Setzt man nun eine der beiden Näherungsformeln in (4.88) ein, erhält man wiederum ein Gleichungssystem der Form

$$[A] \{\varphi_n\} = \{b\} \quad (4.91)$$

mit

$$\{b\} = [\bar{A}]\{\varphi_{n-1}\} + [B] \int_{t_{n-1}}^{t_n} \{J\} dt \quad (4.92)$$

mit dem man das Potenzial zum aktuellen Zeitpunkt t_n ausgehend vom Potenzial zum vorhergegangenen Zeitpunkt t_{n-1} berechnen kann. Dabei beginnt man zum Zeitpunkt t_0 mit dem Potenzial $\{\varphi_0\}$ laut Anfangsbedingung (2.41).

Für die Diskretisierung mittels Rückwärts-Euler-Verfahren gilt

$$[A] = [M_1] + \Delta t [M_2] = \sum_{m=1}^M ([A_{L,\underline{\epsilon}}^{e_m}] + \Delta t [A_{L,\gamma}^{e_m}]) \quad \text{sowie} \quad (4.93)$$

$$[\bar{A}] = [M_1] = \sum_{m=1}^M [A_{L,\underline{\epsilon}}^{e_m}]. \quad (4.94)$$

Bei der Trapezmethode gilt

$$[A] = [M_1] + \frac{\Delta t}{2} [M_2] = \sum_{m=1}^M ([A_{L,\underline{\epsilon}}^{e_m}] - \frac{\Delta t}{2} [A_{L,\gamma}^{e_m}]) \quad \text{sowie} \quad (4.95)$$

$$[\bar{A}] = [M_1] - \frac{\Delta t}{2} [M_2] = \sum_{m=1}^M ([A_{L,\underline{\epsilon}}^{e_m}] + \frac{\Delta t}{2} [A_{L,\gamma}^{e_m}]). \quad (4.96)$$

In beiden Fällen erhält man die Matrix $[B]$ durch Summierung über alle Randelemente mit inhomogenen Neumann-Bedingungen

$$[B] = [M_3] = \sum_{m=1}^M [A_B^{e_m}]. \quad (4.97)$$

Die Summenformeln in (4.93) bis (4.97) sind hier wieder nur symbolisch zu verstehen, da während der Summierung von der lokalen zur globalen Knotennummerierung gewechselt wird.

Die Matrix $[A]$ kann wieder, wie in (4.68), in die Teilmatrizen $[A_A]$, $[A_B]$, $[A_B]^T$ und $[A_D]$ aufgeteilt werden, ebenso die Spaltenmatrix $\{b\}$, wie in (4.83). Damit kann man die unbekanntenen Potenzialwerte $\{\varphi_A\}$ wie in (4.84) berechnen.

Wärmeleitung stationär

Das Gleichungssystem zur Berechnung der stationären Temperaturverteilung (4.39) kann in Matrixschreibweise als

$$[A]\{T\} = \{b\} \quad (4.98)$$

angeschrieben werden mit

$$[A] = \sum_{m=1}^M [A_{L,\gamma_T}^{e_m}] \quad (4.99)$$

und

$$\{b\} = \sum_{m=1}^M [A_P^{e_m}]\{p\} + \sum_{m=1}^M [A_B^{e_m}]\{\Theta\}. \quad (4.100)$$

Beim Bilden der Summen wird hier wieder von lokaler auf globale Knotennummerierung übergegangen.

Wählt man die Reihenfolge der Einträge der Spaltenmatrix der Temperatur wieder so, dass Knoten mit Dirichlet-Bedingungen am Schluss aufscheinen, kann man die Gleichung wie in (4.68) aufspalten und man erhält die unbekanntenen Temperaturwerte $\{T_A\}$ als Lösung des folgenden Gleichungssystems:

$$[A_A]\{T_A\} = \{b_A\} - [A_B]\{T_D\}. \quad (4.101)$$

Wärmeleitung transient

Gleichung 4.40 hat die Form

$$[M_1]\{\dot{T}\} = -[M_2]\{T\} + [M_3]\{p\} + [M_4]\{\Theta\} \quad (4.102)$$

Die Zeitdiskretisierung wird äquivalent zu (4.88)-(4.90) mit dem Rückwärts-Euler- oder Trapezverfahren vorgenommen. Man erhält wiederum ein Gleichungssystem der Form

$$[A]\{T_n\} = \{b\} \quad (4.103)$$

mit

$$\{b\} = [\bar{A}]\{T_{n-1}\} + \sum_{m=1}^M [A_P^{e_m}] \int_{t_n}^{t_{n-1}} \{p\} dt + \sum_{m=1}^M [A_B^{e_m}] \int_{t_n}^{t_{n-1}} \{\theta\} dt. \quad (4.104)$$

Beim Rückwärts-Euler-Verfahren erhält man die Matrizen $[A]$ und $[\bar{A}]$ mit

$$[A] = [M_1] + \Delta t [M_2] = \sum_{m=1}^M (c_p \rho_m [A_P^{e_m}] + \Delta t [A_{L,\gamma_T}^{e_j}]) \quad (4.105)$$

$$[\bar{A}] = [M_1] = \sum_{m=1}^M c_p \rho_m [A_P^{e_m}] \quad (4.106)$$

und beim Trapezverfahren mit

$$[A] = [M_1] + \frac{\Delta t}{2} [M_2] = \sum_{m=1}^M (c_p \rho_m [A_P^{e_m}] + \frac{1}{2} \Delta t [A_{L,\gamma_T}^{e_m}]) \quad (4.107)$$

$$[\bar{A}] = [M_1] - \frac{\Delta t}{2} [M_2] = \sum_{m=1}^M (c_p \rho_m [A_P^{e_m}] - \frac{1}{2} \Delta t [A_{L,\gamma_T}^{e_m}]). \quad (4.108)$$

Im Fall, dass der thermische Leitwert γ_T oder die Wärmekapazität c_p einzelner Materialien nicht konstant ist, muss das natürlich bei der Assemblierung der Matrizen $[A]$ und $[\bar{A}]$ berücksichtigt werden. Und zwar müssen für $[A]$ die Werte zum Zeitpunkt t_n und für $[\bar{A}]$ zum Zeitpunkt t_{n-1} verwendet werden.

Da die elektrischen Zeitkonstanten in der Regel sehr viel kürzer sind als die thermischen, wird für die Berechnung des elektrischen Systems eine stationäre Stromverteilung angenommen.

Unter der Voraussetzung, dass die elektrischen Parameter keine Temperaturabhängigkeit aufweisen, ist deshalb auch die Verlustleistungsdichte $\{p\}$ konstant und das Integral aus (4.104) vereinfacht sich zu

$$\int_{t_n}^{t_{n-1}} \{p\} dt = \Delta t \{p\}. \quad (4.109)$$

Ist hingegen etwa die elektrische Leitfähigkeit von der Temperatur abhängig, muss zur Bestimmung der Verlustleistungsdichte das elektrische System für jeden Zeitschritt neu berechnet werden und das Integral aus (4.104) kann mittels der Trapezformel genähert werden

$$\int_{t_n}^{t_{n-1}} \{p\} dt = \Delta t \frac{\{p_{n-1}\} + \{p_n\}}{2}. \quad (4.110)$$

Gleichung 4.103 kann dann wieder, wie in (4.68), aufgespalten werden und man erhält die unbekanntem Temperaturwerte $\{T_A\}$ als Lösung des Gleichungssystems (4.101).

4.6 Lösung des Gleichungssystems

Zur Berechnung des unbekanntem Lösungsvektors (Potenzial, Temperatur) ist es notwendig, ein lineares algebraisches Gleichungssystem zu lösen, das allgemein in folgender Form angeschrieben werden kann:

$$[A] \cdot \{x\} = \{b\}. \quad (4.111)$$

Dabei ist $\{x\}$ der gesuchte Lösungsvektor, $\{b\}$ der sogenannte Rechte-Seiten-Vektor und $[A]$ die Systemmatrix.

Datenstruktur für die Systemmatrix

Der Rang der Matrix $[A]$ ist im Allgemeinen sehr hoch, er entspricht der Anzahl der Gitterknoten abzüglich jener, die auf einem Dirichlet'schen Rand liegen, sowie der bei schwebenden Randbedingungen durch das Zusammenfassen wegfallenden Knoten. Bei typischen dreidimensionalen Simulationen kann der Rang der Matrix ohne weiteres eine Größenordnung von $10^5 \dots 10^6$ erreichen. Andererseits ist die Besetzungsdichte (das Verhältnis zwischen der Anzahl der Matrixeinträge, die ungleich Null sind, zur Gesamtanzahl) sehr gering. In einer Zeile der Matrix sind nämlich genau soviele Einträge ungleich Null wie der Grad⁷ des zugeordneten Gitterknotens. Da die Knotengrade im Mittel nur von der Art des Gitters, nicht aber von der Größe abhängen, wird mit zunehmenden Rang die Besetzungsdichte immer geringer. Typische Mittelwerte der Knotengrade liegen bei Tetraedergittern mit linearen Ansatzfunktionen etwa bei 11, bei quadratischem Ansatz ungefähr bei 25. So kann man beispielsweise bei einem Gitter mit 250000 Knoten und quadratischem Ansatz eine Besetzungsdichte von etwa 0.01% erwarten. Wenn man nun die gesamte Matrix aus obigem Beispiel in einem zweidimensionalen Feld abspeichern wollte, so bräuchte man dazu, unter der Annahme, dass für eine Gleitkommazahl 8 Byte benötigt werden, einen Speicherplatz von 466 Gigabyte. Angesichts dieses Beispiels erkennt man sofort die Notwendigkeit, die Systemmatrix in einer komprimierten Datenstruktur abzulegen. Würde man

⁷Der Grad eines Knotens gibt an, mit wievielen Nachbarknoten er durch Gitterelemente direkt verbunden ist.

in optimaler Weise ausschließlich die Werte ungleich Null in einem eindimensionalen Feld abspeichern, so käme man mit 48 MB aus. Allerdings fehlt dann die Information in welcher Zeile bzw. Spalte der jeweilige Eintrag liegt. Zu diesem Zweck werden noch zwei zusätzliche Indexvektoren angelegt—der erste ordnet jedem Eintrag die Spaltennummer zu, die Elemente des zweiten Vektors zeigen auf die Zeilenanfänge innerhalb des Feldes. Dieses Datenkompressionsverfahren wird MCSR (Modified Compressed Sparse Row) genannt. Der zusätzliche Speicheraufwand beträgt 50%, sodass man in diesem Beispiel auf einen Gesamtspeicherbedarf von 72 MB kommt. Weiters besteht aufgrund der Symmetrie der Systemmatrix die Möglichkeit nur eine Hälfte (Dreiecksmatrix) abzuspeichern, was den Speicherbedarf nochmals auf die Hälfte reduziert (hier 36 MB).

Um gutes Laufzeitverhalten zu gewährleisten, muss die Datenstruktur so aufgebaut sein, dass der verwendete Gleichungslösungsalgorithmus effizient darauf zugreifen kann. Dabei ist es wichtig, dass beim Zugriff auf Matrixelemente keine Verzögerung durch langes Suchen entstehen und unnötige Operationen mit Null-Einträgen vermieden werden. Mit dem MCSR-Format kann eine Matrix×Vektor-Multiplikation sehr effizient durchgeführt werden, wodurch es sich für die Anwendung beim Konjugierten Gradientenverfahren (siehe unten) besonders eignet.

Anmerkung: Theoretisch wäre eine solche Matrix×Vektor-Multiplikation auch ohne vorherige Assemblierung der Systemmatrix, sondern direkt als Summierung über die Elementmatrizen möglich. Diese Methode kommt mit minimalem Speicherbedarf aus, hat aber einen ungleich höheren Rechenaufwand. Es können jedoch Teilgebiete des Gitters zu Teilmatrizen zusammengefasst werden, und die Matrix×Vektor-Multiplikation getrennt über diese Teilmatrizen ausgeführt und anschließend aufsummiert werden. Dieser Algorithmus kann zur Parallelisierung der Finite Elemente Methode ausgenutzt werden, indem man jedem Teilbereich einen eigenen Prozess zuordnet. Die Aufteilung sollte so geschehen, dass die Anzahl der Kopplungen zwischen den Teilbereichen minimal ist, damit wird auch die Kommunikation zwischen den Prozessen minimiert.

Neben dem Konjugierten Gradientenverfahren wird auch das Gauß'sche Eliminationsverfahren zur Lösung des Gleichungssystems herangezogen. Dafür benötigt man ein Matrixformat, das in jeder Zeile zwischen dem ersten und dem letzten von Null verschiedenen Eintrag einen Speicherplatz reserviert, da diese Einträge später bei der Matrixfaktorisierung verwendet werden. Bei einer symmetrischen Matrix reicht es aus, wenn vom ersten von Null verschiedenen Element bis zur Diagonale Speicherplatz reserviert wird. Man spricht dabei von einer hüllenorientierten Struktur, deren Speicherbedarf von den Bandbreiten der einzelnen Zeilen abhängig ist und im Regelfall einem Vielfachen des MCSR Speicherbedarfs entspricht. Eine Reduktion der mittleren Bandbreite lässt sich durch Umordnen der Knotennummerierung erzielen, was in der Matrix ein Vertauschen von Zeilen und Spalten bewirkt (und natürlich auch in den $\{x\}$ und $\{b\}$ Vektoren). Dafür haben sich das Cuthill-McKee-Verfahren (CM) bzw. das Reverse-CuthillMcKee-Verfahren (RCM) etabliert [117]. Die Wirkungsweise des RCM Verfahrens ist in Abb. 4.5 anhand eines Beispiels dargestellt.

Wie weit die mittlere Bandbreite einer Matrix durch Umsortieren minimiert werden kann, hängt nicht nur vom verwendeten Verfahren ab, sondern in viel stärkerem Ausmaße von der Struktur der Matrix (bzw. des Gitters) selbst. Beispielsweise lassen sich bei der dreidimensionalen Widerstandsberechnung bei sehr langen und dünnen Leitungen sehr geringe mittlere Bandbreiten (60 und darunter) erreichen.

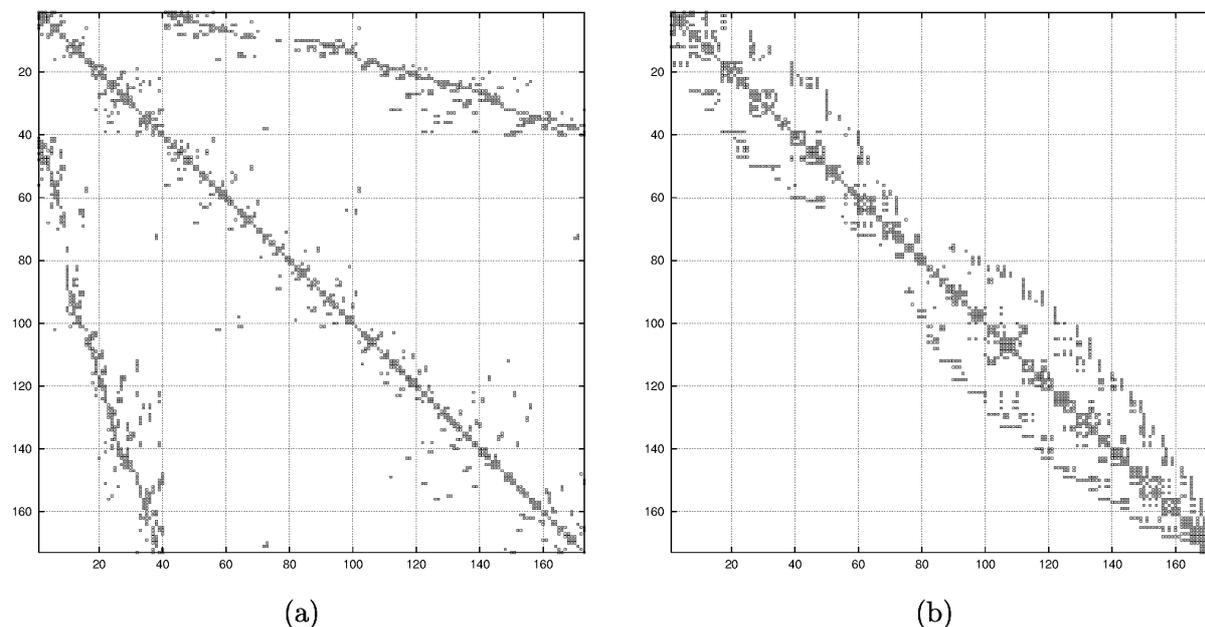


Abbildung 4.5: Einträge in der Systemmatrix einer einfachen zweidimensionalen Feldberechnung mit einem Dreiecksgitter und quadratischen Ansatzfunktionen unmittelbar nach der Assemblierung (a) und nach Anwendung des Reverse-Cuthill-McKee Verfahrens (b).

Gleichungslösung durch Gauß'sche Elimination

Als erster Schritt wird die Systemmatrix in ein Produkt aus einer unteren $[L]$ und einer oberen $[U]$ Dreiecksmatrix faktorisiert:

$$[A] = [L] \cdot [U]. \quad (4.112)$$

Danach kann die Lösung $\{x\}$ in zwei Teilschritten (Vorwärtseinsetzen und Rückwärtseinsetzen) berechnet werden:

$$[L] \cdot \{y\} = \{b\} \quad (4.113)$$

$$[U] \cdot \{x\} = \{y\} \quad (4.114)$$

Der rechenintensivste Teil ist die Faktorisierung, sie hat bei vollbesetzten Matrizen einen Aufwand von $O(n^3)$, Vorwärtseinsetzen und Rückwärtseinsetzen lediglich $O(n^2)$. Mit geringerer Bandbreite reduziert sich natürlich auch der Rechenaufwand entsprechend.

Für die Berechnung von Kapazitäten, Widerständen, oder transienten Vorgängen muss oft ein System mit gleicher Matrix $[A]$ aber verschiedener rechter Seite gelöst werden. In diesem Fall braucht die (langsame) Faktorisierung nur beim ersten Mal durchgeführt werden und die Lösung $\{x\}$ kann bei jedem weiteren Schritt sehr effizient mittels Vorwärtseinsetzen und Rückwärtseinsetzen berechnet werden.

Zur weiteren Reduktion des Speicherbedarfs kann die Assemblierung und Elimination kombiniert werden: In diesem Fall wird die Systemmatrix nicht in Teilmatrizen aufgespalten sondern es wird komplett mit allen Randknoten gearbeitet. Diese Methode bietet sich besonders an,

wenn man nicht an einer Verteilung des Potenzials im Inneren des Simulationsgebietes, sondern lediglich an einer Kapazitäts- oder Widerstandsmatrix interessiert ist. Sobald sämtliche Elemente, die einen bestimmten Gitterknoten gemeinsam haben, assembliert worden sind, kann dieser Knoten aus dem Gleichungssystem eliminiert werden. Randknoten, die zu einer Elektrode gehören, können, da sie auf dem selben Potenzial liegen, ebenfalls zusammengefasst werden. In diesem Fall erspart man sich die Rücksubstitution und erhält direkt die gewünschte (Kapazitäts- bzw. Leitwert-) Matrix.

Der CG-Gleichungslöser

Das konjugierte Gradientenverfahren (CG) ist eine sehr häufig verwendete Methode lineare Gleichungssysteme iterativ zu lösen. Es zeichnet sich besonders dadurch aus, dass es nahezu keinen zusätzlichen Speicherplatz benötigt und im Regelfall mit deutlich weniger Rechenoperationen auskommt als die Gauß'sche Elimination. Allerdings handelt es sich bei der erhaltenen Lösung nur um eine Näherung, da die Iteration abgebrochen wird sobald ein Konvergenzkriterium erfüllt ist⁸. Voraussetzung ist eine symmetrische und positiv definite Systemmatrix. Der Rechenaufwand des CG-Verfahrens ist proportional zur Wurzel der spektralen Konditionszahl der Matrix, das ist das Verhältnis zwischen größtem und kleinstem Eigenwert.

Näher soll im Rahmen dieser Arbeit nicht auf das CG-Verfahren eingegangen werden—es sei an dieser Stelle auf die ausführliche Darstellung in [118] verwiesen.

Zur Beschleunigung der Konvergenz besteht die Möglichkeit der Vorkonditionierung. Anstatt (4.112) wird das System

$$[M]^{-1} \cdot [A] \cdot \{x\} = [M]^{-1} \cdot \{b\} \quad (4.115)$$

verwendet. Die Matrix $[M]$ versucht man nun so zu wählen, dass die Konditionszahl des Produktes $[M]^{-1} \cdot [A]$ kleiner ist als die von $[A]$ alleine, etwa durch eine unvollständige Cholesky-Zerlegung [82, 119, 120].

Der CG-Algorithmus kann auch erweitert werden, sodass für mehrere rechte Seiten ohne großen zusätzlichen Aufwand gleichzeitig Lösungen berechnet werden können [121, 122].

4.7 Nichtlineare Probleme

Die elektrischen und thermischen Leitfähigkeiten wurden bei den obigen Berechnungen immer als konstant angenommen. Tatsächlich zeigen sie jedoch eine leichte Temperaturabhängigkeit, welche eine Nichtlinearität der Gleichungssysteme bei der (elektro-)thermischen Simulation verursacht. Da die elektrische/thermische Leitfähigkeit direkt in die Systemmatrix eingeht, bedeutet das, dass die Matrixeinträge ebenfalls von der Temperaturverteilung abhängen, die aber erst nach Lösen des Gleichungssystems bekannt ist. Es wird deshalb ein einfaches Iterationsverfahren verwendet, um die korrekte Lösung zu ermitteln. Zuerst wird eine konstante Temperaturverteilung von 300 K angenommen. Damit werden das elektrische und das thermische Gleichungssystem assembliert und gelöst. Man erhält eine neue Temperaturverteilung, die als Startwert für die nächste Iteration herangezogen wird. Als Konvergenzkriterium werden $e_1 = \{\varphi\}^T \cdot [A] \cdot \{\varphi\}$ für das elektrische System (= Verlustleistung) und $e_2 = \{T\}^T \cdot [A] \cdot \{T\}$ für das thermische System herangezogen. Wenn von einer zur nächsten Iteration die Änderung dieser beiden Werte unter

⁸Theoretisch liefert das CG-Verfahren die exakte Lösung in höchstens N Schritten, praktisch erhält man aber schon viel früher eine hinreichend genaue Näherungslösung.

einem vorgegebenem Grenzwert liegt, kann die Iterationsschleife abgebrochen werden. Da die Nichtlinearität relativ schwach ist, konvergiert das Verfahren rasch (typischerweise 4–6 Iterationen). Es ist deshalb nicht notwendig, aufwendigere Methoden mit besserer Konvergenz, wie z.B. das Newton-Verfahren, anzuwenden.

Kapitel 5

Geometrische Modellierung und Gittererzeugung

Genauigkeit und Rechenaufwand einer Simulation hängen nicht nur von dem gewählten Diskretisierungsverfahren ab, sondern in erster Linie von der Qualität und der Feinheit des Gitters. Das Gitter ist ein zelluläres Modell des zu simulierenden Objektes und muss dieses hinreichend genau beschreiben. Geometrische Modellierung und Gittergeneration stellen die Basis für die räumliche Diskretisierung und somit für die numerische Lösung partieller Differentialgleichungen dar.

5.1 Geometrie Repräsentationen

Zur Darstellung dreidimensionaler geometrischer Objekte in Computerprogrammen sind verschiedene Methoden gebräuchlich, die je nach Anwendungsbereich gewisse Vor- und Nachteile bieten [123–126]. Die drei am häufigsten verwendeten Darstellungsformen sind

- Boolesche Modelle (CSG=**C**onstructive **S**olid **G**eometry),
- Oberflächendarstellung (BRep=**B**oundary **R**epresentation) und
- zelluläre Darstellungsformen (CD=**C**ellular **D**ecomposition).

Boolesches Geometriemodell (CSG)

Diese Form der Geometrierepräsentation wird häufig in CAD Programmen zur Konstruktion mechanischer Teile verwendet. Die geometrischen Grundelemente sind Ebenen, die den Raum in zwei Hälften (Halbräume) teilen. Mittels logischer Verknüpfungsoperationen lassen sich damit beliebige durch ebene Flächen begrenzte Geometrien erstellen. Abgespeichert wird die Struktur in einem baumförmigen Graphen, dessen Blätter die Grundelemente darstellen und dessen innere Knoten entweder logische (UND, ODER, ...) oder geometrische (Translation, Rotation, ...) Operationen bedeuten. Beispielsweise lässt sich ein Quader als UND-Verknüpfung (Durchschnitt) von sechs Halbräumen darstellen (siehe auch Abb. 5.1).

Für Oberflächen quadratischer Ordnung kann man als Grundelemente zusätzlich zu den Halbräumen noch die Kugel, den (unendlich langen) Zylinder und den Torus verwenden. Im Prinzip können auch andere Oberflächen wie z.B. Splineflächen als Grundelement verwendet

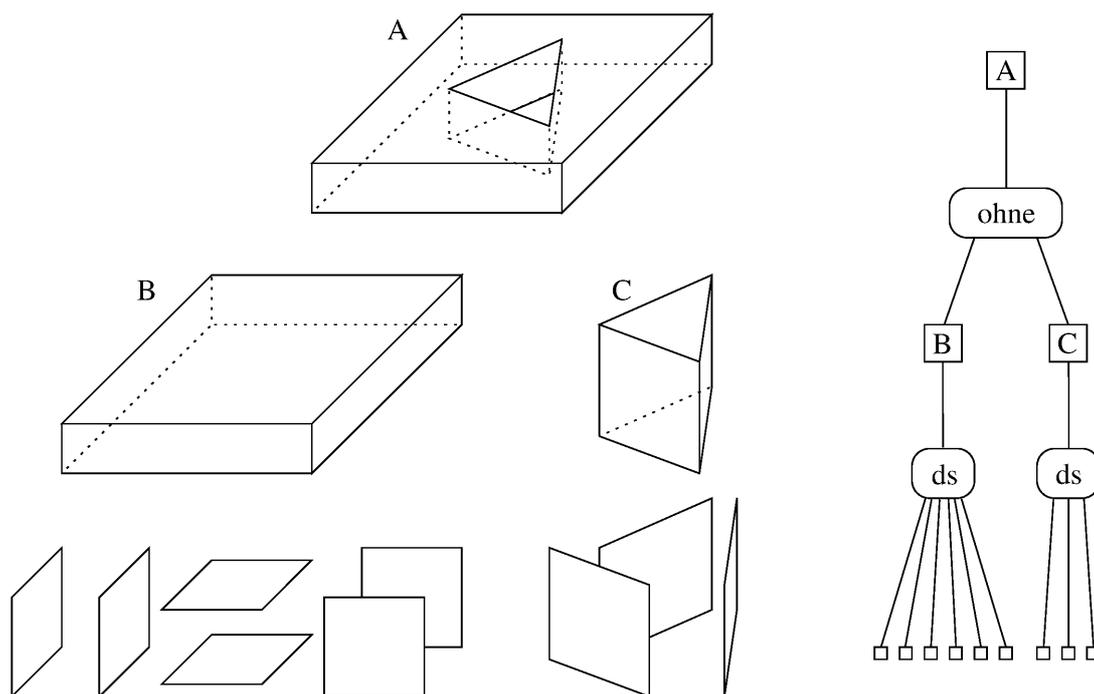


Abbildung 5.1: Konstruktion einer CSG Geometrie: Ein Quader (B) wird als Durchschnitt (ds) von sechs Halbräumen gebildet, das (unendlich lange) dreieckige Prisma (C) aus drei Halbräumen. Mit der Operation „B ohne C“ wird ein Quader mit einem dreieckigen Loch (A) konstruiert.

werden. Eine notwendige Bedingung ist allerdings, dass die Flächen entweder geschlossen sind oder unendliche Ausdehnung haben, sodass der Raum eindeutig in ein *inneres* und ein *äußeres* Gebiet aufgeteilt wird.

Das Erzeugen der Kanten und Eckpunkte der Geometrie ist mit großem Rechenaufwand verbunden, da hierzu alle Grundelemente untereinander verschnitten werden müssen. Hingegen ist es relativ einfach festzustellen, ob ein (beliebiger) Punkt innerhalb oder außerhalb der Geometrie liegt (Punktsuche). Dazu wird für jedes Grundelement getestet, ob der Punkt innerhalb oder außerhalb liegt. Die Ergebnisse der Einzeltests werden dann anhand des Graphen logisch verknüpft.

Oberflächendarstellung (BRep)

Bei der Oberflächendarstellung (Boundary Representation) bilden die Eckpunkte, die durch ihre Koordinaten gegeben sind, die Basis der Geometrie—im Gegensatz zu CSG, wo die topografische Information durch Ebenengleichungen festgelegt ist. Ausgehend von den Punkten ist der Aufbau streng hierarchisch (siehe auch Abb. 5.2). So ist eine Kante durch zwei Eckpunkte definiert, Flächen sind durch die Kanten, die den Rand bilden, gegeben. Zu beachten ist dabei, dass Flächen mit Löchern nicht nur einen äußeren, sondern auch einen oder mehrere innere Ränder haben. Körper (Solids) sind durch ihre Randflächen festgelegt. Sie haben genau einen äußeren Rand, können aber auch innere Ränder besitzen (Hohlräume oder Einschlüsse).

Während es bei CSG-Geometrien keine Probleme mit Datenkonsistenz gibt (jede beliebige

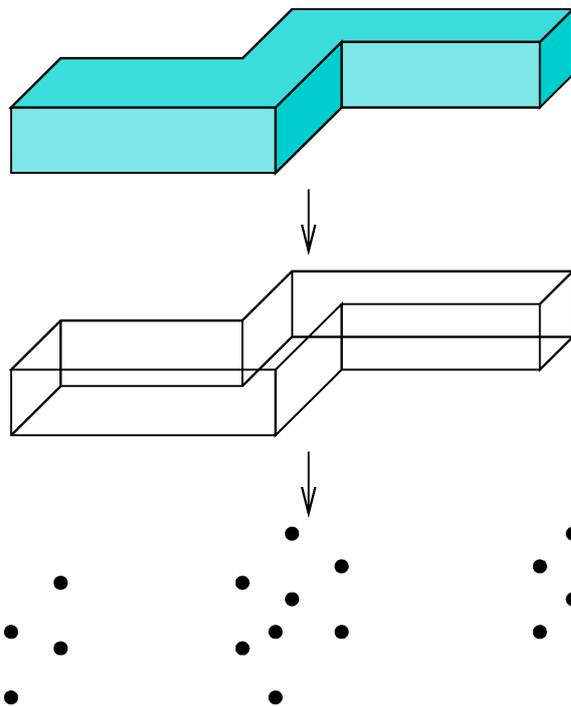


Abbildung 5.2: Streng hierarchischer Geometrieaufbau der Oberflächenrepräsentation: Körper werden durch ihre Randflächen festgelegt, die wiederum sind durch ihre Randlinien gegeben, welche durch jeweils zwei Punkte definiert sind.

darstellbare Geometrie ist eine gültige Geometrie), muss bei der Oberflächendarstellung streng auf topologische und topografische Konsistenz geachtet werden. Um topologische Konsistenz zu erreichen, muss garantiert sein, dass

- Linien mit genau zwei Punkten verknüpft sind,
- Flächen zu nicht mehr als zwei Solids gehören,
- die Berandung(en) von Flächen und Solids geschlossen ist (sind), und
- Solids und Flächen genau einen äußeren Rand haben.

Für topografische Konsistenz wird gefordert, dass

- die Berandung von Flächen in einer Ebene liegt,
- keine Verschneidungen auftreten,
- Solids, die sich in einem Punkt, Linie oder Fläche berühren, auch im Datenformat diesen Punkt, Linie oder Fläche gemeinsam haben,
- wenn mehr als 3 (bzw.. 2) Ebenen im Datenformat einen Punkt (eine Linie) gemeinsam haben, sie sich auch tatsächlich in diesem Punkt (dieser Linie) schneiden.

Manche Operationen können daher nur unter bestimmten Voraussetzungen oder in Kombination mit anderen „passenden“ Operationen durchgeführt werden. So darf beispielsweise eine Fläche, die zwei Solids trennt, nicht gelöscht werden, außer man verbindet gleichzeitig die Solids miteinander. Aber auch bei an sich korrekten geometrischen Operationen muss immer darauf geachtet werden, dass nicht etwa durch numerische Ungenauigkeiten Inkonsistenzen entstehen.

Umgehen kann man dieses Problem durch Verwendung einer exakten rationalen Arithmetik. Dabei handelt man sich aber wieder den Nachteil ein, dass einerseits die Ausgangsdaten selten in einem rationalen Format vorliegen und es dadurch bei der Konvertierung zu topologischen Inkonsistenzen kommen kann und andererseits, dass gewisse geometrische Operationen dadurch unmöglich gemacht werden (z.B. Rotation).

Zelluläre Geometrien

Bei den zellulären Darstellungsformen wird die Geometrie aus einfachen dreidimensionalen Grundelementen (z.B. Tetraeder oder Würfel) zusammengesetzt. Dabei kann man zwischen *strukturierten* und *unstrukturierten* Gittern unterscheiden.

Bei unstrukturierten Gittern ist weder die Anordnung der Knotenpunkte noch der Gitterelemente einer bestimmten Regelmäßigkeit unterworfen (siehe Abb. 5.3).

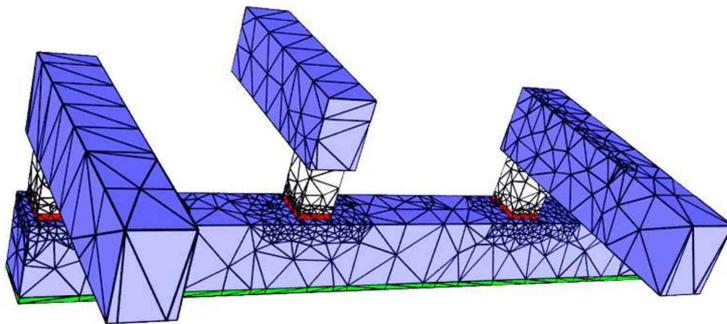


Abbildung 5.3: Ein unstrukturiertes Tetraedergitter

Abgespeichert wird ein unstrukturiertes Gitter durch eine Punktliste und eine Elementliste. Die Punkte sind durch ihre Koordinaten gegeben, die Elemente referenzieren ihre Knoten durch Indizes auf die Punktliste. Bei Gittern mit verschiedenen Grundelementen muss zusätzlich noch der jeweilige Elementtyp angegeben werden.

Strukturierte Gitter sind topologisch regelmäßige Hexaedergitter. Jeder Gitterpunkt und jede Zelle kann durch ein Indextripel (i, j, k) eindeutig identifiziert werden. Als Beispiel seien die Gitter der Finiten Differenzen Methode erwähnt (siehe auch Abb. 5.4).

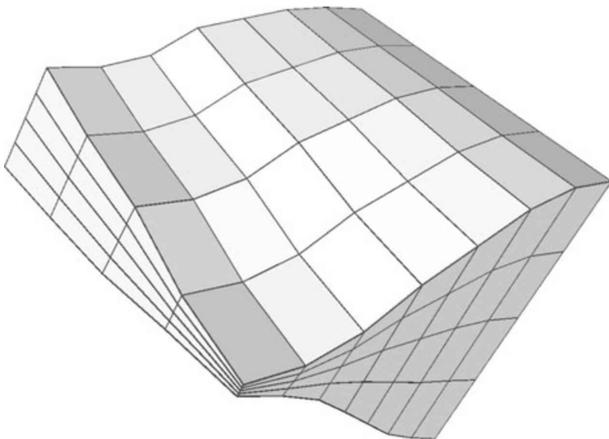


Abbildung 5.4: Ein strukturiertes Gitter

Bei strukturierten Gittern brauchen die Elemente nicht explizit abgespeichert werden, da ihre Eckpunkte direkt in der Punktliste mit den drei Richtungsindizes gefunden werden können.

Ortho-Produkt-Gitter sind strukturierte Gitter bei denen nicht nur die Topologie der Zellen sondern auch die Koordinaten der Gitterknoten einer Regelmäßigkeit unterliegen. Jede Gitterzelle sowie das Gesamtgitter hat Parallelogramm- (2D) bzw. Spatform (3D). Jeder der drei Gitterindizes unterteilt eine Hauptachse des Gitters in sogenannte *Ticks*. Fallen die Hauptachsen mit den Achsen des Koordinatensystems zusammen, spricht man von einem rectilinearen Gitter (Abb. 5.5a).

Bei der **Voxeldarstellung**¹, oder auch kartesisches Gitter genannt (Abb. 5.5b), gilt zusätzlich, dass alle Zellen gleiche Abmessungen haben. Ein Voxelgitter ist durch Angabe des Koordinatenursprungs, der Breite/Höhe/Tiefe einer Zelle sowie der Anzahl der Zellen in x , y , und z -Richtung vollständig definiert.

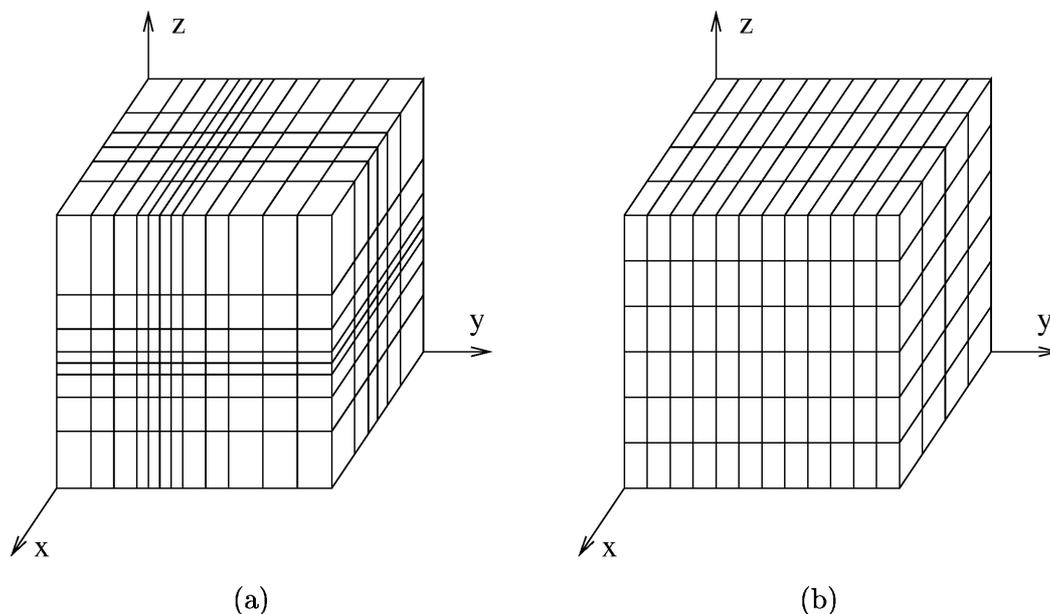


Abbildung 5.5: Rectilineares Gitter (a) und Voxeldarstellung (b) als Spezialfälle strukturierter Gitter

Generell ist man mit Ortho-Produkt-Gittern sehr stark in der Darstellung allgemeiner Geometrien eingeschränkt. Für nicht hexaederförmige Strukturen muss man für jede Gitterzelle eine Boolesche Variable abspeichern, die angibt ob die jeweilige Zelle zur Geometrie gehört oder nicht. Kommen mehrere Materialien vor, so verwendet man stattdessen eine Indexvariable, die das entsprechende Material anzeigt (oder Vakuum, falls die Zelle nicht zur Geometrie gehört).

Flächen, die nicht zu den Gitterachsen parallel sind, können lediglich stufenförmig angenähert werden. Damit durch die Diskretisierung nicht kleine geometrische Details verloren gehen, muss man die Gitterdichte ausreichend hoch wählen (Abb. 5.6).

¹Voxel= *Volume Element*, in Analogie zu *Pixel*.

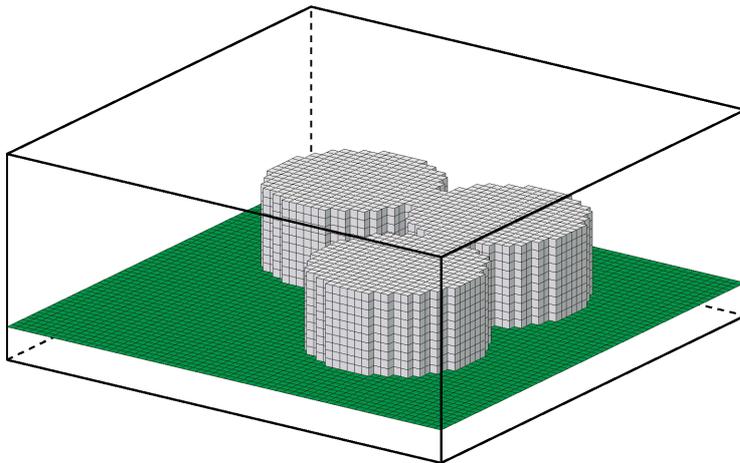


Abbildung 5.6: Geometrie in Voxeldarstellung: Flächen, die nicht zu den Koordinatenachsen parallel sind müssen stufenförmig angenähert werden.

Bei der Voxeldarstellung kann man zur Reduktion des Speicherbedarfs die Tatsache, dass benachbarte Zellen mit hoher Wahrscheinlichkeit aus dem selben Material sind, ausnutzen, um eine komprimierte Darstellung zu erzielen z.B. mittels eines Octree oder mittels Lauflängencodierung.

Ähnlich wie beim CSG-Modell ist jede darstellbare Voxel-Geometrie auch automatisch gültig, was sich natürlich positiv auf die Robustheit voxelbasierter Algorithmen auswirkt.

5.2 Punktsuche

Das Auffinden des nächsten Gitter- bzw. Geometriepunktes oder das Feststellen in welcher Gitterzelle bzw. in welchem Solid sich ein vorgegebener Punkt befindet ist eine Prozedur, die bei vielen geometrischen Operationen als Teilschritt enthalten ist. Wie schon oben erwähnt, ist diese Aufgabe bei CSG-Geometrien sehr einfach zu implementieren. Ebenso bei Ortho-Produkt-Gittern—die Suche kann hier für jede Koordinatenachse getrennt durchgeführt werden (am effizientesten mittels binärem Suchen). Bei allgemeinen strukturierten Gittern, unstrukturierten Gittern sowie BRep Geometrien ist ein effizientes Suchverfahren in der Implementierung deutlich aufwendiger. Natürlich ist es möglich, alle Zellen des Gitters bzw. alle Solids der Geometrie nacheinander zu prüfen, ob der gesuchte Punkt enthalten ist. Da die Tests, ob ein Punkt innerhalb eines bestimmten Körpers ist, relativ aufwendig sind, hat diese Methode auch einen großen Bedarf an CPU-Zeit. Man kann zwar mittels sogenannter Boundingbox-Tests eine deutliche Geschwindigkeitssteigerung erzielen, jedoch bleibt der Rechenaufwand bei einer Größenordnung von $O(n)$. Hingegen erreichen Verfahren, die mit einem Suchbaum arbeiten in der Regel einen Aufwand von $O(\ln(n))$.

Punkt-Octree

Nach dem gleichen Prinzip wie ein *binärer Baum* für eindimensionale Daten arbeitet der Punkt-Octree (oder auch Point-Bucket-Octree) bei der Suche nach Geometriepunkten in drei Dimensionen. Jeder Knoten des Octrees entspricht einem Würfel (bzw. Quader) und wird durch seine Kinder in acht Würfel mit der halben Seitenlänge aufgeteilt (Abb. 5.7). Die Wurzel des Baumes bildet ein Würfel, der das gesamte darzustellende Gebiet umschließt.

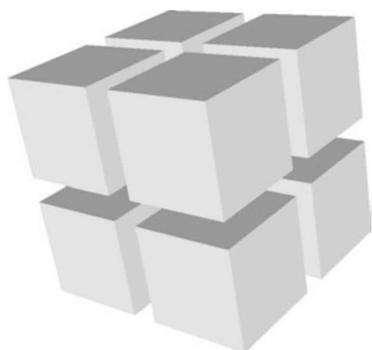


Abbildung 5.7: Aufteilung eines Octree-Knotens in acht gleichgroße Sub-Würfel: Die Teilung der Würfel wird rekursiv fortgesetzt bis sich maximal ein Geometriepunkt darin befindet.

Neben dem Suchen nach vorhandenen Punktkoordinaten kann man den Punkt-Octree auch zum Auffinden von Punkten in einem vorgegebenen Bereich, Suchen des nächstgelegenen Punktes und ähnlichen Operationen verwenden. Der Aufwand dieser Operationen beträgt $O(\ln(n))$ unter der Voraussetzung, dass der Octree zumindest einigermaßen balanciert ist, ansonsten kann er zu $O(n)$ ausarten.

Da die Flächen des Octrees parallel zu den Koordinatenachsen sind, können Vergleiche, ob Punkte in einem Würfel liegen oder nicht, für die x , y , und z -Koordinaten exakt durchgeführt werden, und man braucht keine Abstände oder Schnitte zu berechnen, was zu numerischen Ungenauigkeiten führen könnte.

Erweiterter Octree

Mit einem erweiterten Octree (auch *Finite Octree*) [127] lassen sich nicht nur die Punkte, sondern auch die Linien, Flächen und Solids einer Struktur geometrisch ordnen. Er eignet sich deshalb zur Suche von Objekten in unstrukturierten Gittern oder BRep-Geometrien. Wie beim Punkt-Octree wird der Raum in Würfel eingeteilt, wobei jeder Würfel in acht Sub-Würfel aufgeteilt wird, bis ein Grenzkriterium erreicht wird. Abbildung 5.8 zeigt die vier möglichen Fälle, bei denen die Aufteilung abgebrochen wird, da ein weiteres Zerlegen des Würfels mindestens einen Sub-Würfel des selben Typs hätte. Einen Knoten, der nicht weiter zerteilt wird, nennt man *Blatt*.

Im Fall, dass ein Geometrie-Punkt sehr nahe an einer Teilungsebene des Octrees liegt, und zwei Linien oder Flächen, die in einem sehr spitzen Winkel zueinander stehen, diese Ebene durchstoßen, ist der Abstand der Durchtrittspunkte(-linien) sehr klein. Er kann sogar kleiner als die Auflösung der im Rechner darstellbaren Zahlen werden, was zur Folge hat, dass dieser Fall nicht im Octree darstellbar ist, da nicht mehr weiter unterteilt werden könnte. Um dies zu verhindern wird ein neuer Blatt-Typ eingeführt (Graues Blatt). Sein Aufbau (siehe Abb. 5.9) ist ähnlich dem Punkt-Blatt mit der Ausnahme, dass sich der Punkt außerhalb des Blattes befinden darf, alle Flächen und Linien innerhalb des Blattes müssen jedoch diesen Punkt enthalten.

Ob sich ein Punkt in einem bestimmten Octree-Würfel befindet oder nicht, kann wie zuvor durch direkten Koordinatenvergleich herausgefunden werden. Schwieriger ist es zu bestimmen, ob eine Linie oder Fläche einen Würfel schneidet. Zwar gibt es dafür einfache Testverfahren, doch muss dabei unbedingt darauf geachtet werden, dass es nicht etwa durch numerische Ungenauigkeiten zu inkonsistenten Ergebnissen kommt. Es ist deshalb ratsam ein Verfahren zu wählen, das auf Punktvergleichen basiert, da diese exakt durchgeführt werden können. Die Aufgabe kann also folgendermaßen formuliert werden: *Finde einen Punkt, der falls die Fläche*

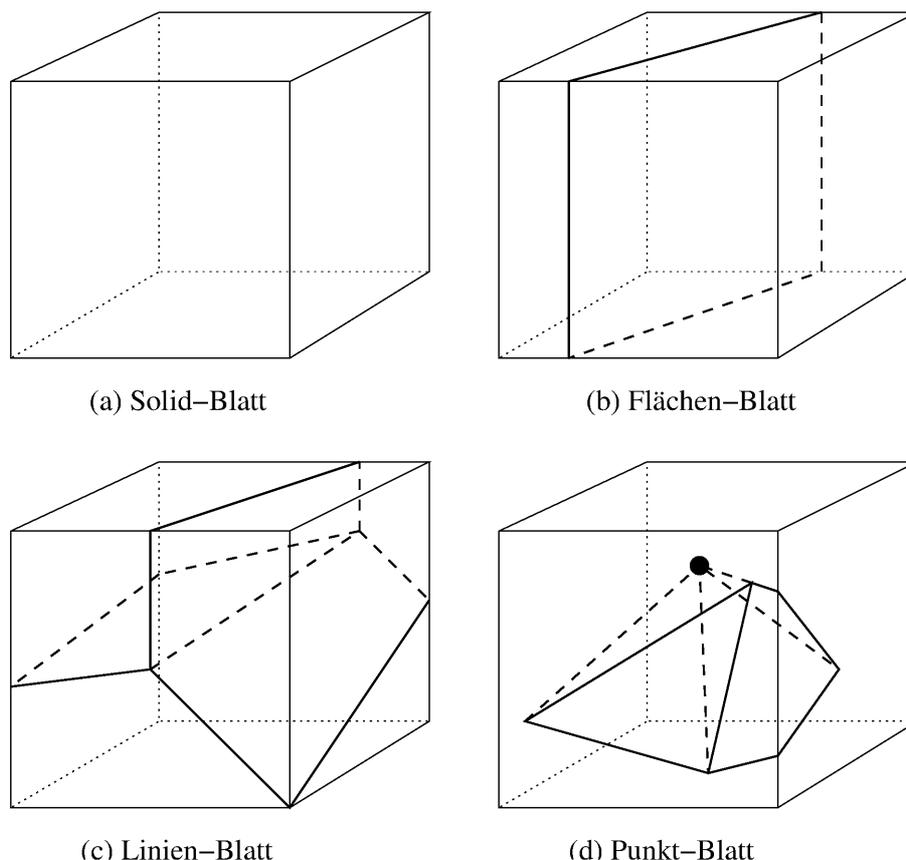


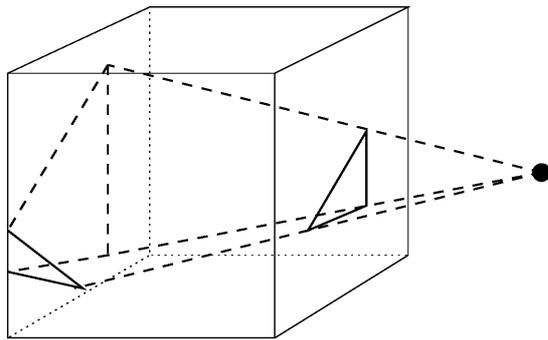
Abbildung 5.8: Blatt-Typen in einem erweiterten Octree

(Linie) den Würfel schneidet, mit Sicherheit innerhalb des Würfels liegt. Ein solcher Punkt kann durch Schnitt mit den Raumdiagonalen ($x = \pm y = \pm z$) bzw. mit den Diagonalebene ($x = \pm y$, $x = \pm z$, $y = \pm z$) des jeweiligen Würfels gefunden werden. Da benachbarte Würfel Raumdiagonalen und Diagonalebene gemeinsam haben, ist garantiert, dass auch die Schnittfunktionen ungeachtet numerischer Ungenauigkeiten das gleiche Ergebnis liefern und Konsistenz gewährleistet ist.

Neben dem beschleunigten Suchen nach Geometrieelementen kann ein erweiterter Octree auch effizient zur Kollisionserkennung, Gittererzeugung [128, 129], Voxel-Diskretisierung und Booleschen Operationen (siehe unten) verwendet werden.

BSP-Baum

Da bei einem Octree immer an vordefinierten Stellen parallel zu den Koordinatenebenen unterteilt wird, kann es bei stark nichtsymmetrischen Geometrien vorkommen, dass der Baum nicht gut balanciert ist, was die Leistungsfähigkeit beim Suchen verringert. Auch bei der Darstellung dünner Schichten, die nicht parallel zu den Achsen sind, kommt es zu Leistungseinbußen, da hier so oft verfeinert werden muss, bis die Grenzflächen in verschiedenen Würfeln liegen (Abb. 5.10). Diese Nachteile lassen sich durch den BSP-Baum (*Binary Space Partitioning*) beheben. Die Wurzel dieses Baumes repräsentiert den gesamten Raum. Jeder Knoten hat (nicht wie beim



Graues Blatt

Abbildung 5.9: Erweiterung der Octree-Blatt-Typen: Das graue Blatt gleicht dem Punkt-Blatt mit der Ausnahme, dass der dazugehörige Punkt in einer Nachbarzelle liegt.

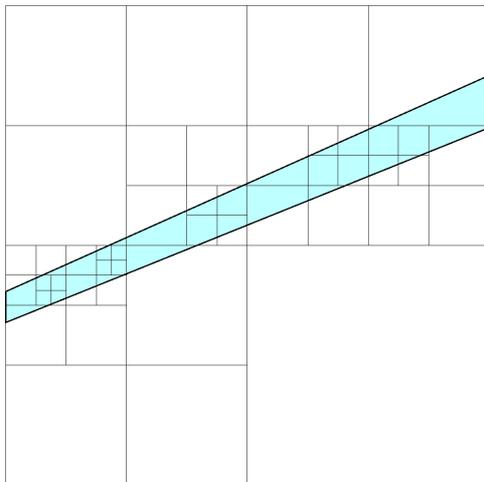


Abbildung 5.10: Schnitt durch einen Octree: Zur Auflösung dünner Schichten muss oftmals verfeinert werden, wodurch die Tiefe des Baumes stark ansteigen kann.

Octree acht, sondern) genau zwei Kinder, die durch Teilung mittels einer Ebene entstehen. Als Teilungsebenen verwendet man Flächen der Geometrie und wählt diese so aus, dass ein (annähernd) balancierter Baum entsteht. Das Aufteilen wird abgebrochen, wenn ein Blatt des Baumes ausschließlich in einem einzigen Solid liegt. Der BSP-Baum bildet somit einen Übergang von der BRep- zur CSG-Darstellung.

5.3 Geometrische Operationen und Modellierung

Bisher wurde gezeigt, wie Geometrien gespeichert werden, bzw. wie man darin effizient sucht, nicht aber wie man sie erzeugen oder verändern kann. Selten wird für eine Simulation die Struktur im entsprechenden Datenformat händisch eingegeben, da eine solche Eingabe aufwendig und sehr fehleranfällig wäre. Deshalb ist es notwendig, dass eine komplexe dreidimensionale Struktur mittels geometrischer Operationen aus mehreren „Einzelteilen“ aufgebaut werden kann.

Extrusion

Vielfach liegt eine Beschreibung der Struktur in einem zweidimensionalen Format vor (Layout). Um daraus einen dreidimensionalen Körper zu erzeugen verschiebt man die zweidimensionale Fläche entlang einer Achse normal auf die Zeichenebene um einen bestimmten Abstand (Dicke).

Dieser Vorgang wird als Extrusion bezeichnet. Man kann anstatt in Richtung der Oberflächennormale auch entlang einer vorgegebenen Kurve verschieben. Zusätzlich können auch gewisse Parameter des zweidimensionalen Objektes während des Verschiebens verändert werden. Dabei ist jedoch darauf zu achten, dass es zu keinen Selbstdurchdringungen oder Kollisionen mit anderen Objekten kommt.

Boolesche Operationen

Darunter versteht man die logische Verknüpfung von Körpern mittels Operationen wie UND, ODER, OHNE, wie zuvor bei der CSG-Darstellung erläutert. CSG-Geometrien können ohne zusätzlichen Aufwand direkt miteinander verknüpft werden.

Auch bei der Voxeldarstellung ist eine Implementierung relativ einfach. Die logische Operation kann hier Voxel für Voxel ausgeführt werden.

Boolesche Operationen sind an sich nur für zwei Materialarten (bzw. Material/kein Material) definiert. Eine Erweiterung auf mehrere Materialien kann durch Aufstellen von Verknüpfungsregeln oder einer Entscheidungstabelle vorgenommen werden.

Bei Geometrien in BRep-Darstellung und unstrukturierten Gittern sind Boolesche Operationen deutlich komplizierter zu realisieren. Sollen zwei Geometrien miteinander verknüpft werden, muss jede Fläche und Linie der ersten Geometrie mit jeder Fläche und Linie der zweiten verschnitten werden. Dabei muss man (besonders bei schleifenden Schnitten) darauf achten, dass durch numerische Fehler keine Inkonsistenzen auftreten. Hier ist es oft nützlich, Flächen, Linien und Punkte mit einer sogenannten Epsilon-Umgebung zu versehen. Schneiden sich beispielsweise zwei Linien nicht direkt in einem Punkt, sondern kommen sie einander lediglich so nahe, dass ihr Abstand kleiner dem vorgegebenen ϵ ist, dann wird dieser Fall als Schnitt gewertet. Natürlich kann auch ein zu groß gewähltes ϵ falsche Entscheidungen bewirken und damit Inkonsistenzen herbeiführen. Im Regelfall sind aber die Abstände innerhalb gegebener Geometrien groß gegenüber den erwarteten numerischen Ungenauigkeiten, sodass die Verwendung von Epsilon-Umgebungen meist zur Erhöhung der Robustheit beiträgt.

Doppelt vorkommende Flächen, Linien, oder Punkte müssen nach dem Verschneiden entfernt werden. Danach werden die Solids rekonstruiert und gemäß den Verknüpfungsregeln das Material gewählt.

Eine Vereinfachung ergibt sich bei unstrukturierten Gittern wenn man als Solids ausschließlich Tetraeder zulässt [130]. Treten beim Verschneiden andere Polyeder auf, so werden diese sofort wieder in Tetraeder aufgespalten. Der Vorteil dabei ist, dass man mit simplen Datenstrukturen das Auslangen findet und die Implementierung der Schnittfunktionen stark vereinfacht wird. Das aus solchen Operationen resultierende Tetraedergitter ist allerdings nicht direkt für die Simulation geeignet, da es in den meisten Fällen zu fein und von schlechter Qualität ist.

Verschneidung mittels Octree

Boolesche Operationen mit BRep-Geometrien oder unstrukturierten Gittern lassen sich durch die Verwendung erweiterter Octrees deutlich beschleunigen. Dazu wird für beide Geometrien ein Octree parallel aufgebaut. Mit parallel ist hier gemeint, dass beide Bäume die selbe Topologie haben, bzw. bis zur gleichen Tiefe verfeinert sind. Die logische Verknüpfung wird dann Blatt für Blatt durch beide Bäume ausgeführt. Für jede Kombination von Blatttypen wird eine Funktion implementiert, die die Verknüpfung durchführt. Handelt es sich dabei um zwei Solid-Blätter ist

das Resultat trivialerweise ebenfalls ein Solid laut den Verknüpfungsregeln. Bei einem Solid-Blatt und einem Blatt anderen Typs hat das Ergebnis den Typ des zweiten Blattes. Bei zwei Flächen-Blättern wird zuerst getestet, ob sich die Flächen innerhalb des Würfels schneiden. Ist dies der Fall, entsteht ein Linien-Blatt, ansonsten wird weiter verfeinert. Bei einem Flächen- und einem Linien-Blatt kann ein Punkt-Blatt entstehen, oder es wird weiter verfeinert, ebenso bei zwei Linien-Blättern. Bei einem Flächen- und einem Punkt-Blatt ergibt sich wiederum ein Punkt-Blatt, wenn der Punkt innerhalb der Fläche liegt, ansonsten muss verfeinert werden. Zwei Punkt-Blätter ergeben wieder ein Punkt-Blatt, wenn beide Punkte die selben Koordinaten haben, ansonsten wird verfeinert.²

Nach dem Verschneiden kann man die Geometrie noch vergrößern, indem man alle Elemente, die nicht strukturbestimmend sind, entfernt (z.B. benachbarte Solids mit gleichem Material können zusammengelegt werden und die trennende Fläche entfernt werden ...).

Modellierung durch Topografie-Simulation

Konventionelle Modellierungsverfahren gehen davon aus, dass die erzeugte Struktur genau dem vorgegeben Entwurf entspricht. Im Fall der Modellierung von Verbindungsstrukturen werden aus den einzelnen Masken für Metalllagen und Vias mittels Extrusion Schichten erzeugt, die dann aufeinandergestapelt die dreidimensionale Struktur ergeben [131].

Vor allem bei Strukturen, die nahe an die prozesstechnischen Grenzen kommen, treten jedoch teilweise große Abweichungen zwischen Entwurf und erzeugter Struktur auf. Dabei können etwa Abrundungen, Hohlräume, nicht-planare Schichten, abgeschrägte Seitenflächen usw. entstehen. Diese Unterschiede werden vor allem durch Abbildungsfehler in den Lithografieschritten, sowie Abweichungen in den Ätz-, Depositions- und Planarisierungsprozessen verursacht [132, 133] und haben zum Teil große Auswirkungen auf die elektrischen Eigenschaften der erzeugten Verbindungsstrukturen. Um diese Auswirkungen zu berücksichtigen, ist es notwendig, anstatt die geometrische Struktur direkt aus der Maskeninformation geometrisch zu erzeugen, die einzelnen Prozessschritte nacheinander mittels Topografiesimulation zu modellieren.

Um einen Ätz- oder Depositionsschritt zu simulieren, wird folgendermaßen vorgegangen: Zuerst wird die Prozessdauer in eine Reihe kleinerer Zeitschritte diskretisiert. Zu jedem Zeitschritt wird dann für jeden Punkt der Oberfläche die Ätz- bzw. Depositionsrate nach physikalischen Modellen berechnet, wodurch man Vektoren erhält, die die Lage der Oberfläche nach diesem Zeitschritt beschreiben.

Zur Konstruktion der neuen Oberfläche gibt es Verfahren, die auf polygonalen (BRep) oder zellulären (Voxel) Modellen basieren.³ Bei polygonalen Verfahren werden die Geometriepunkte der Oberfläche entlang der berechneten Vektoren verschoben. Bei Ecken und Spitzen, sowie an konkaven Stellen kann es notwendig sein, zusätzliche Punkte (sowie Linien und Flächen) einzufügen bzw. zu entfernen. Der weit aufwendigste Teil bei diesem Verfahren ist jedoch das Erkennen und Entfernen bzw. die Vermeidung sogenannter „Oberflächenschleifen“. Sie entstehen beispielsweise, wenn bei einer Deposition die Geometrie über einer konkaven Stelle „zusammenwächst“, sodass eine Selbstdurchdringung und somit eine inkonsistente Darstellung entstehen würde [134].

Dieses Problem kann bei den zellulären Verfahren nicht auftreten und man erreicht damit eine

²Zur Vereinfachung der Darstellung wurde das graue Blatt außer Acht gelassen.

³Anmerkung: Prinzipiell würde sich auch die CSG-Darstellung anbieten, da CSG Geometrien immer konsistent sind. Es ist mir jedoch keine derartige Implementierung bekannt.

gute Robustheit, allerdings auf Kosten eines höheren Speicher- und Rechenaufwands. Besonders viel Speicher wird benötigt, wenn eine extrem hohe Auflösung zur genauen Diskretisierung von dünnen Schichten notwendig ist [135]. Das Ergebnis der zellulären Topografiesimulation ist leider nicht unmittelbar für nachfolgende FEM-Simulationen brauchbar, da die Gitterdichte viel zu hoch ist. Auch wenn man die Voxelgeometrie direkt in eine Oberflächendarstellung umwandelt, erhält man aufgrund der vielen Stufen eine große Anzahl kleiner Oberflächenelemente, was einer effizienten Weiterverarbeitung hinderlich ist. Um eine geeignete polygonale Darstellung zu erhalten, bedarf es deshalb spezieller Glättungs- und Vergrößerungsmethoden.

5.4 Erzeugung des Simulationsgitters

Wie bereits in der Einleitung der Arbeit erwähnt, muss das Rechengitter die reale Geometrie möglichst präzise widerspiegeln, um genaue Simulationsergebnisse zu ermöglichen (geometrie-konformes Gitter). Die bei der Simulation von Verbindungsleitungen auftretenden geometrisch komplexen Strukturen mit stark unterschiedlichen Größenverhältnissen, dünnen Schichten und mehreren Bereichen verschiedener Materialien erfordern für die Gittererzeugung sehr aufwendige Algorithmen [136, 137]. Neben der erwähnten Geometriekonformität muss das Gitter noch weitere wichtige Eigenschaften aufweisen: Die Gitterdichte muss ausreichend hoch sein, um die Diskretisierungsfehler gering zu halten. Um iterative Lösungsverfahren effizient anwenden zu können, sollte die Form der Elemente so beschaffen sein, dass eine gut konditionierte Systemmatrix resultiert. Gleichzeitig sollte die Anzahl der Gitterpunkte klein sein, da sie sowohl den Speicherbedarf als auch die Laufzeit der Simulation beeinflussen. Die Gittererzeugung spielt deshalb für dreidimensionale Simulationen komplexer Strukturen eine Schlüsselrolle, da hier oft der Speicherbedarf entscheidet, ob eine Simulation durchführbar ist oder nicht.

Es ist nicht trivial ein solchermaßen „optimales“ Gitter zu finden, da es sowohl an die Geometrie als auch an den Differentialoperator samt Randbedingungen angepasst sein muss. Prinzipiell kann man erst nach beendeter Simulation und Analyse der Fehler die Qualität des Gitters beurteilen. Für die Ermittlung einer geeigneten Gitterdichteverteilung verwendet man deshalb entweder heuristische Methoden, oder Verfahren, die zuerst eine Simulation mit einem groben Initialgitter durchführen, um anschließend gemäß eines Fehlerkriteriums das Gitter gezielt zu verfeinern. Bei einem zu groben Initialgitter besteht dabei das Risiko, dass stark dynamische Bereiche der Lösung nicht ausreichend aufgelöst und deshalb die Fehler falsch eingeschätzt werden. Ein zu feines Initialgitter kann wiederum einen untragbar hohen Rechenaufwand zur Folge haben, wodurch das Problem der Wahl der Gitterdichte in abgeschwächter Form auf das Initialgitter übertragen wird. Es können deshalb einige Iterationen notwendig sein, bis man ein geeignetes Rechengitter gefunden hat.

Im Allgemeinen sind für die Gittererzeugung zur Lösung der Poisson-Gleichung heuristische Ansätze ausreichend. Die größte Dynamik in der Lösung ist an inhomogenen Stellen der Geometrie (Kanten, Ecken, dünne Schichten), sowie in Bereichen, wo die Quelledichtefunktion groß ist, zu erwarten. Es ist deshalb sinnvoll, an solchen Stellen die Gitterdichte zu erhöhen. Da die Fundamentallösung (Green'sche Funktion) des Laplace-Operators mit der Entfernung abklingt, kann man auch die Dichte des Gitters mit der Entfernung zu kritischen Bereichen abnehmen lassen. Abrupte Übergänge im Größenverhältnis benachbarter Gitterelemente sollten vermieden werden.

Da das Gitter konform zur Geometrie sein muss, ist bei kleinen Oberflächendetails auch

automatisch die Gitterdichte hoch. Damit sich die hohe Gitterdichte ausreichend ins Innere fortpflanzt, kann man z.B. eine Beschränkung des Verhältnisses der Kantenlängen benachbarter Elemente fordern.

Für eine gute Kondition der Systemmatrix erweist es sich als günstig, wenn die Gitterelemente möglichst keine spitzen Winkel aufweisen. Eine Beschränkung des minimalen Winkels der Gitterelemente erhöht deshalb die Gitterqualität. Die Erfüllung eines solchen Kriteriums kann aber nur unter bestimmten Voraussetzungen an die Geometrie garantiert werden [138].

Das Problem der Gittererzeugung lässt sich nun in zwei Teilaufgaben aufspalten, und zwar die Wahl der Gitterpunkte und die Konstruktion der Elemente. Für die Konstruktion der Gitterelemente wird sehr häufig die Delaunay-Zerlegung verwendet. Dabei werden die Gitterdreiecke (-Tetraeder) so gebildet, dass innerhalb des Umkreises (der Umkugel) kein weiterer Gitterpunkt liegt. Im zweidimensionalen Fall ist es immer möglich so eine Zerlegung an einen gegebenen Rand anzupassen (Constrained Delaunay Triangulation), im dreidimensionalen Fall kann es notwendig sein, zusätzliche Gitterpunkte einzufügen, um randkonforme Gitter zu erhalten. Eine weitere wichtige Eigenschaft der Delaunay-Zerlegung ist, dass für eine gegebene Punktverteilung das erzeugte Gitter bezüglich der minimalen Elementswinkel optimal ist, was zu einer besseren Konvergenz iterativer Lösungsverfahren beiträgt. Für Materialien mit anisotropen Eigenschaften kann das Delaunay-Kriterium entsprechend modifiziert werden.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf verschiedene existierende Gittergeneratoren zurückgegriffen, die in den folgenden Absätzen kurz vorgestellt werden.

Zweidimensionale Gitter: Für die Simulation zweidimensionaler Geometrien wurden die Programme *Triangle* [139] und *Trigen* [140] verwendet. Ersteres ist ein Delaunay-Gittergenerator, der es erlaubt die Gitterqualität mittels Beschränkungen für den minimalen Winkel und die maximale Fläche eines Dreiecks zu kontrollieren. Er zeichnet sich durch eine hohe Robustheit aus, die unter anderem durch Verwendung einer adaptiven exakten Arithmetik erreicht wird.

Bei *Trigen* hat man die Möglichkeit mittels Begrenzungen für die maximale Kantenlänge und für das Größenverhältnis benachbarter Dreiecke Einfluss auf die Gitterdichte zu nehmen. Durch Vertauschen von Kanten wird versucht die Qualität der Dreiecke zu optimieren, das erzeugte Gitter ist aber nicht notwendigerweise ein Delaunay-Gitter. Ein Nachteil dieses Verfahrens ist, dass damit nur einfach zusammenhängende Gebiete trianguliert werden können—mehrfach zusammenhängende Gebiete müssen zuvor aufgeteilt werden.

Layer-Methode: Die schichtweise aufgebaute Verbindungsstruktur kann für eine vereinfachte Gittererzeugung ausgenutzt werden. Dazu werden die Linien aller Schichten auf eine zweidimensionale Ebene projiziert und sämtliche Schnitte berechnet (siehe Abb. 5.11). Anschließend wird mit einem zweidimensionalen Gittergenerator ein Dreiecksgitter erzeugt. Mittels Extrusion „zieht“ man dieses Gitter in die dritte Dimension durch alle Schichten der Struktur. Man erhält ein prismatisches Gitter, das durch Aufspalten der Prismen in ein Tetraedergitter umgewandelt wird. Ist das zweidimensionale Ursprungsgitter ein Delaunay-Gitter und sind die Schichten planar, so besitzt auch das erzeugte Tetraedergitter Delaunay-Eigenschaft. Da das erzeugte Gitter das Produkt aus einem zweidimensionalen und einem eindimensionalen Gitter ist, kann die Gitterdichte nicht völlig frei gewählt werden. Ist beispielsweise eine hohe Gitterdichte in einem bestimmten zweidimensionalen Bereich gefordert, so erstreckt sich dieser Bereich automatisch in der dritten Dimension durch alle Schichten. Weiters kann es bei dieser Methode zu ungewollt

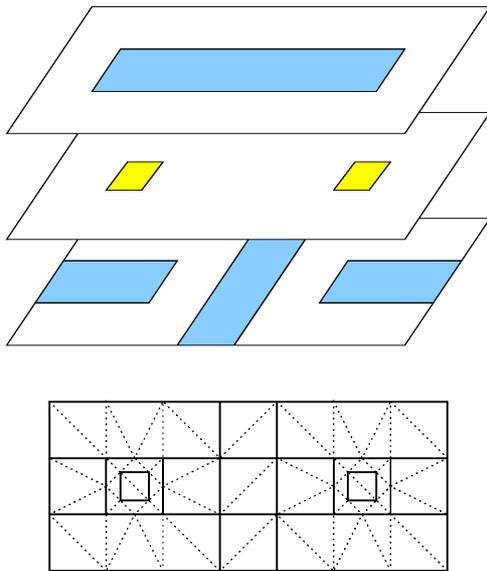


Abbildung 5.11: Gittererzeugung mit der Layer-Methode: Die Linien aus allen Schichten werden auf eine Ebene projiziert und in dieser vergittert. Daraus wird für jede Schicht ein Prismengitter konstruiert, das in Folge in Tetraeder aufgespalten wird.

hohen Gitterdichten kommen, wenn Linien aus unterschiedlichen Lagen in der Projektion knapp nebeneinander liegen.

Unstrukturierte Gittererzeugung: Der Gittergenerator *Delink* [141] wird verwendet um dreidimensionale unstrukturierte Delaunay-Gitter zu erzeugen. Das Programm zeichnet sich durch hohe Robustheit unter endlicher Rechengenauigkeit aus. Eine fortschreitende Front durchläuft die gewünschten Gebiete und füllt sie mit Tetraedern aus. Es handelt sich dabei um eine Delaunay-konforme Gittererzeugung, wobei die Oberfläche zuerst durch eine Verfeinerung vorbehandelt wird. In diesem Schritt wird auch der Rand von nicht tetrahedrisierbaren Strukturen automatisch verfeinert und somit tetrahedrisierbar gemacht.

Gitterverfeinerung

Wenn die geforderte Genauigkeit einer Simulation mit einem bestimmten Gitter nicht erreicht werden kann, wird es notwendig, Methoden zur Gitterverfeinerung anzuwenden. Dies kann beispielsweise durch globale Verfeinerung, durch die Vorgabe von Punkten oder Linien an Stellen mit geringer Gitterdichte, die dann ins Gitter übernommen werden oder durch Qualitätskriterien erfolgen.

Globale Gitterverfeinerung wird angewendet, wenn das ursprüngliche Gitter bereits hohe Elementqualität aufweist und gut an die Lösung angepasst ist, jedoch generell zu große Elemente enthält. Bei Dreiecksgittern werden dazu einfach alle Dreiecke in vier (oder 9, 16, usw.) kleinere Dreiecke aufgespalten. Da die entstandenen Dreiecke ähnlich zu den ursprünglichen sind, bleibt die Gitterqualität erhalten.

Bei einem Tetraeder kann man lediglich vier ähnliche Tetraeder an seinen Ecken abspalten (Abb. 5.12). Dabei bleibt in der Mitte ein Oktaeder bestehen. Dieser Oktaeder lässt sich wiederum in vier Tetraeder aufspalten (Abb. 5.13). Dabei gibt es drei verschiedene Varianten, je nachdem um welche Raumdiagonale aufgeteilt wird. Diese Tetraeder haben jedoch keine

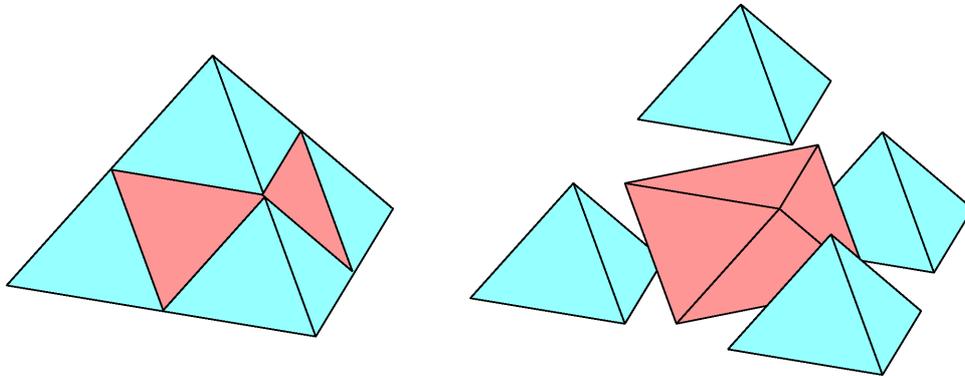


Abbildung 5.12: Zerlegung eines Tetraeders in vier ähnliche Tetraeder und einen Oktaeder

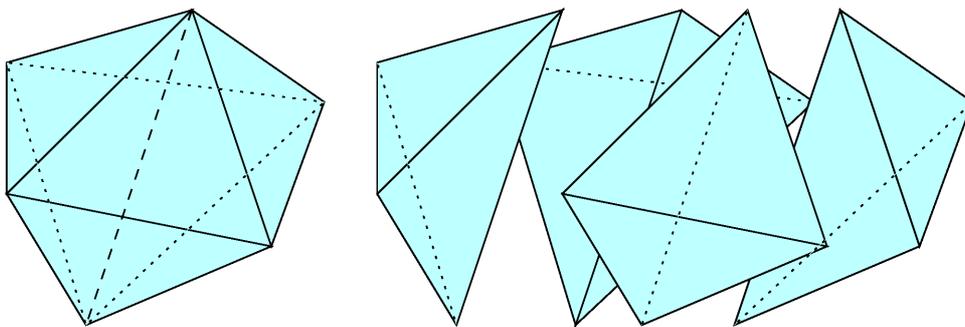


Abbildung 5.13: Ein Oktaeder kann in vier Tetraeder zerlegt werden, indem diese rund um eine Raumdiagonale (strichlierte Linie) des Oktaeders abgespalten werden. Wählt man dazu die kürzeste der drei Diagonalen erreicht man die beste Gitterqualität.

geometrische Ähnlichkeit zum Ursprungstetraeder. Die beste Elementqualität erreicht man, wenn rund um die kürzeste Raumdiagonale aufgespalten wird.

Gitterverfeinerung durch geometrische Vorgaben: Eine höhere Gitterdichte kann man erreichen, indem man zusätzliche Punkte und Kanten in die Ausgangsgeometrie einfügt und vom Gittergenerator fordert, dass diese in das erzeugte Gitter integriert werden sollen. Ein Beispiel dafür ist die in Abb. 5.14 dargestellte Gitterverfeinerung mittels „Dummy-Flächen“ und „Dummy-Layern“. Hier wird die Layer-Methode zur Gittererzeugung verwendet und eine zusätzliche Schicht (in der Abbildung rot dargestellt) mit einem Quadrat, dessen Kantenlänge etwas kleiner als der Kontakt ist (nicht sichtbar) eingefügt, um in der Umgebung der Kontaktierung die Gitterdichte zu erhöhen. Um schlechte Gitterelemente zu verhindern, ist hier die Verwendung eines Winkelkriteriums für den zweidimensionalen Gittergenerator erforderlich.

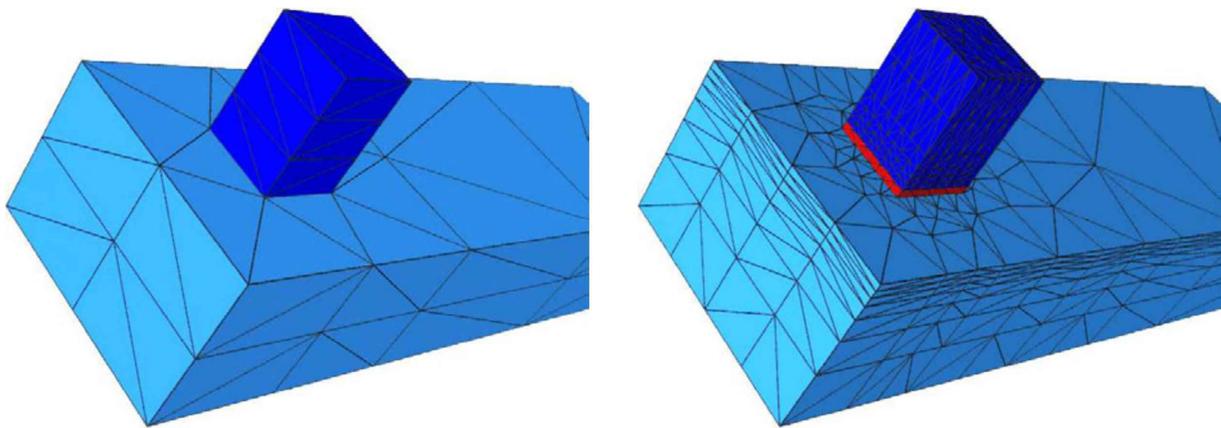


Abbildung 5.14: Struktur eines einfachen Kontakts ohne (links) und mit (rechts) einem sogenannten “Dummy-Layer” um die Gitterdichte zu erhöhen

Das linke Gitter in Abb. 5.14 hat 58 Knotenpunkte und liefert bei einer Widerstandsberechnung einen Fehler von 14.3%, das rechte hat 1440 Knoten und ergibt einen Fehler von 3.6%. Wenn das linke Gitter mehrfach global verfeinert wird, bis der Fehler die gleiche Größenordnung erreicht, wächst die Knotenzahl auf 9117 und sowohl Simulationszeit als auch Speicherverbrauch auf mehr als das Sechsfache.

Zum Vergleich ist in Abb. 5.15 ein Gitter angegeben, das mit dem Programm Delink erzeugt wurde. Hier wurde durch gezielte Streuung der Gitterpunkte eine hohe Gitterdichte im Bereich des Kontaktüberganges erreicht. Der Simulationsfehler ist mit diesem Gitter etwa gleich groß wie bei der Layer-Methode mit Dummy-Elementen, allerdings kommt man mit einer wesentlich geringeren Anzahl von Knoten (775) aus.

In Tab. 5.1 sind die Fehler der Simulationsergebnisse mit dem einfachen Laygrid-Gitter, dem Laygrid-Gitter mit Dummy-Elementen (Laygrid II) und einem Delink-Gittern gegenübergestellt. Man erkennt, dass das mit Delink erzeugte Gitter für eine vorgegebene Fehlerschranke am wenigsten Gitterpunkte benötigt.

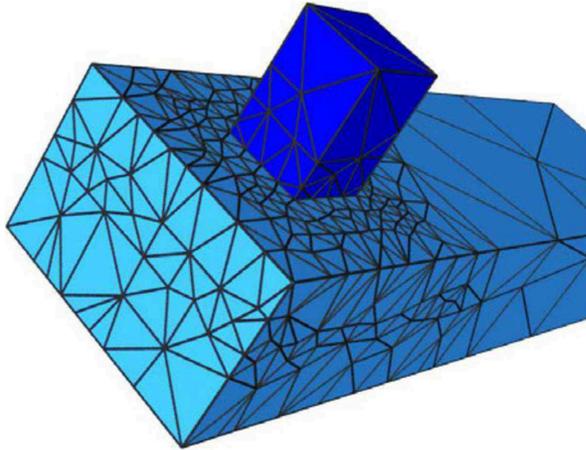


Abbildung 5.15: Ein mit dem Programm Delink erzeugtes unstrukturiertes Tetraedergitter

Tabelle 5.1: Vergleich der Simulationsgitter

	Laygrid		Laygrid II		Delink	
	Knoten	Fehler	Knoten	Fehler	Knoten	Fehler
ohne Verfeinerung	58	14.3%	1440	3.6%	775	3.9%
1×global Verf.	240	9.9%	10143	1.7%	5575	1.8%
2×global Verf.	1375	6.3%	75957	0.7%	42061	0.8%
3×global Verf.	9117	3.7%	587529	0.3%	326233	0.3%

Kapitel 6

Dreidimensionale Visualisierung

Unter Visualisierung versteht man die grafische Darstellung von Simulationsergebnissen sowie die dafür notwendige Vorverarbeitung und Aufbereitung der Daten. Bei der Simulation von Verbindungsstrukturen gibt es verschiedene Arten von Ergebnisdaten:

1. diskrete skalare Größen, wie etwa berechnete Widerstände und Kapazitäten,
2. zeitabhängige Größen, wie z.B. der transiente Verlauf der Spannung an einem Kontakt,
3. räumlich verteilte Größen, wie etwa Potenzial- und Stromdichteverteilungen,
4. geometrische Strukturen aus verschiedenen Materialien und Simulationsgitter.

Die grafische Darstellung, der in den beiden letzten Punkten genannten Daten ist die anspruchsvollste Aufgabe, da hierbei dreidimensionale Daten in eine zweidimensionale Darstellung gebracht werden müssen, wobei alle wichtigen Informationen trotz der Reduktion um eine räumliche Dimension erkennbar bleiben bzw. durch die Visualisierung erst herausgearbeitet werden sollen.

Die Abbildung dreidimensionaler Objekte auf eine zweidimensionale Bildebene erfolgt üblicherweise durch parallele bzw. perspektivische Projektionen oder mittels Schnitten. Die Darstellung einer verteilten skalaren Größe, wie Potenzial oder Temperatur wird durch den Farb- oder Helligkeitswert bzw. durch Isolinien ausgedrückt. Dabei kommen verschiedene Techniken zur Anwendung die in den folgenden Abschnitten kurz vorgestellt werden.

Grundsätzlich können die meisten Visualisierungsverfahren in zwei Teilaufgaben getrennt werden:

- (a) Erstellung eines dreidimensionalen polygonalen Modells aus den Rohdaten.
- (b) Projektion auf eine zweidimensionale Ebene.

Unter Punkt (a) fallen beispielsweise Algorithmen zur Extraktion der Oberfläche eines Gitters, die Berechnung von Isoflächen, Vektorpfeilen, Vektorlinien, usw.

Algorithmen zur Entfernung verdeckter Flächen, Berechnung von Lichteffekten und Umwandlung in eine zweidimensionale Pixeldarstellung gehören zum zweiten Punkt (b). Den Unterschied zwischen Visualisierung und Computergrafik machen die in Punkt (a) genannten Algorithmen aus, die speziell für die Verarbeitung verteilter Größen entwickelt wurden. Für die

Darstellung der damit aufbereiteten Daten am Bildschirm (rendering) bedient man sich der im zweiten Punkt genannten Methoden, die aus dem Bereich der Computergrafik stammen.

Auf Unix-Systemen hat sich die Grafikkbibliothek OpenGL von Silicon Graphics [142] zu einem Defacto-Standard etabliert. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Mesa-Library [143], eine freie OpenGL Implementierung, als Grafikkbibliothek verwendet. Da die meisten Grafikkbibliotheken für die Bildschirmdarstellung auf Geschwindigkeit optimiert sind, bieten sie rechenintensive Methoden wie etwa Antialiasing (Unterdrückung von Stufeneffekten bei der Rasterung) oder komplexere Beleuchtungsmodelle nicht oder nur in vereinfachter Form an. Für photorealistische Darstellungen werden deshalb physikalisch motivierte Methoden verwendet (z.B. Raytracing), die allerdings wegen des hohen Rechenaufwands nicht für die interaktive Bearbeitung geeignet sind. Beispielsweise wurde Abb. 6.9 mit dem Raytracing-Programm BMRT [144] erstellt.

Für die in Punkt 1 genannten Aufgaben wurde das Programm VTK (Visualization Tool-Kit) [145–147] verwendet, das eine Vielzahl von Visualisierungsalgorithmen zur Verfügung stellt. Ein modulares Konzept erlaubt es die einzelnen Algorithmen miteinander zu kombinieren, wodurch ein hoher Grad an Flexibilität erreicht wird. Der Großteil der Algorithmen ist als Filter konzipiert. Das bedeutet, dass der Eingang des Filters mit einem gegebenen Datenobjekt verknüpft wird und man dann am Ausgang ein durch den Algorithmus verändertes Datenobjekt erhält.

Im Folgenden werden einige Visualisierungsmethoden, die speziell für unstrukturierte Gitter geeignet sind, erläutert.

6.1 Oberflächendarstellung

Die einfachste Methode eine verteilte Größe darzustellen ist auf der Oberfläche der Geometrie. Dabei können zuvor bestimmte Teile der Geometrie (z.B. das umgebende SiO_2) entfernt werden um Strukturen im Inneren sichtbar zu machen. Zu diesem Zweck muss aus dem Gitter mit Volumenelementen (Tetraedern) die Oberfläche in einer polygonalen Darstellung gewonnen werden. Dies wird erreicht, indem man jeden Tetraeder in seine Oberflächendreiecke zerlegt und diese in einer Liste abspeichert. Kommt in dieser Liste ein Dreieck doppelt vor, so handelt es sich um ein inneres (und deshalb unsichtbares) Dreieck und es kann somit entfernt werden.

Ein Beispiel ist in Abb. 6.1 gegeben. Hier ist das elektrische Potenzial auf der Oberfläche eines Leiters als Helligkeitswert dargestellt. Die Skala am rechten Rand bildet die Zuordnung zwischen Graustufe und Potenzialwert (in mV). Bei dieser Art der Darstellung ist es wichtig, dass auch die Kanten der Geometrie eingezeichnet sind, da sonst die geometrische Struktur nicht gut erkennbar wäre.

Abbildung 6.2 zeigt die gleiche Struktur mit dem Unterschied, dass anstelle der Helligkeit der Farbwert benutzt wird, um das Potenzial an der Oberfläche darzustellen. Man erreicht dadurch eine bessere Erkennbarkeit, da Farben im Allgemeinen leichter unterschieden werden können als Grauwerte.

Zwei Variationen der Oberflächendarstellung mit Farbskala sind in Abb. 6.3 (a) und (b) dargestellt. Da die Farbe und Helligkeit eines Punktes voneinander unabhängige Größen sind, kann man mittels Schattierung die geometrische Struktur hervorheben. Dazu nimmt man eine Lichtquelle in der Nähe des Betrachters an und berechnet die Helligkeit eines jeden Punktes abhängig von dem zwischen Oberflächennormale und Richtung zur Lichtquelle eingeschlossenem Winkel (Abb. 6.3a). Hierbei ist anzumerken, dass Schattierung und Grauskala sich nicht miteinander

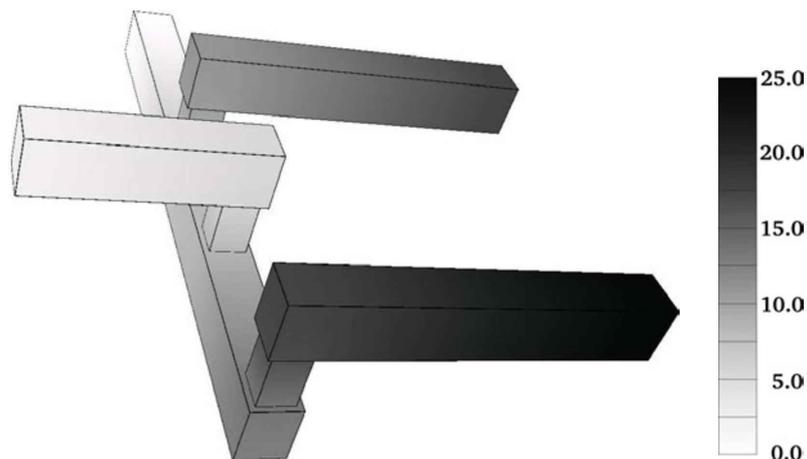


Abbildung 6.1: Das elektrische Potenzial (in mV) ist auf der Oberfläche eines Leiters als Helligkeitswert (Grauskala) dargestellt.

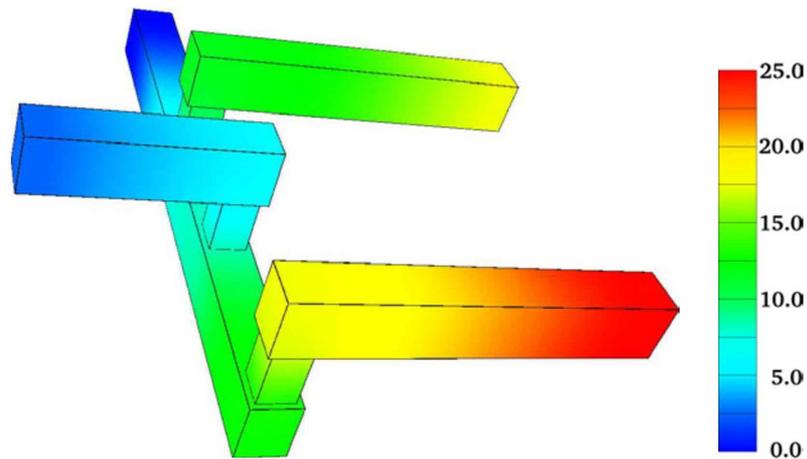


Abbildung 6.2: Oberflächendarstellung des Potenzials (in mV) mit Farbskala.

vereinbaren lassen, da durch die Schattierung die Grauwerte verfälscht würden.

Wenn man anstatt eines kontinuierlichen Farbverlaufes die Anzahl der Farben auf einen endlichen Wert beschränkt (16 in Abb. 6.3b), geht dabei zwar Information verloren, aber es werden dadurch Isolinien (Linien gleichen Potenzials) erkennbar, die sich aus den Farbstufen ergeben.

6.2 Isoflächendarstellung

Eine Isofläche ist die Menge aller Punkte, auf denen die darzustellende Größe einem festgelegten Wert entspricht. Üblicherweise werden mehrere Isoflächen gleichzeitig angezeigt, die den Wertebereich in äquidistante Intervalle teilen. Die Flächennormale zeigt immer in Richtung des Gradienten und der Abstand zwischen zwei benachbarten Isoflächen ist verkehrt proportional zum Betrag des Gradienten.

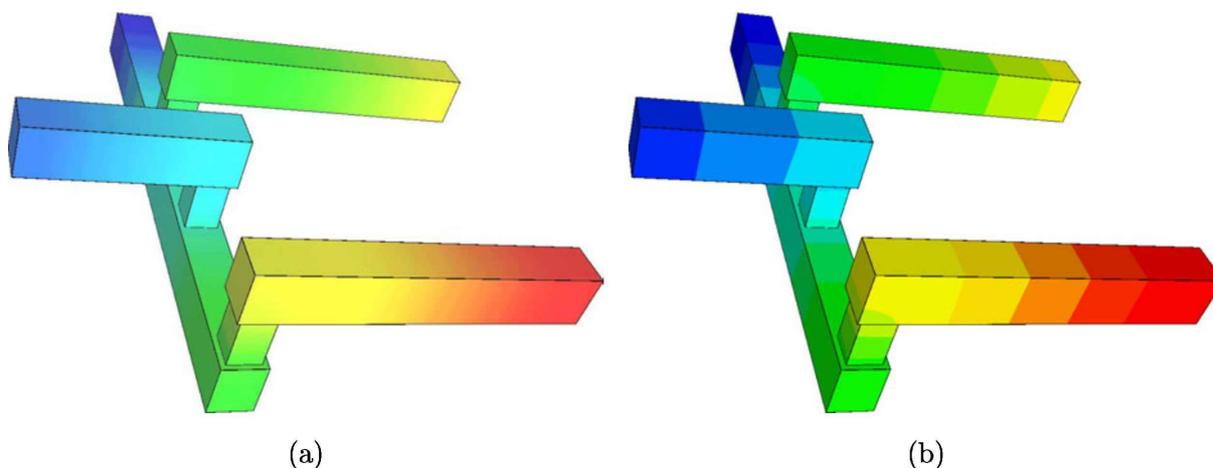


Abbildung 6.3: Darstellung des elektrischen Potentials auf der Oberfläche eines Leiters mit Schattierung (a) und abgestuftem Farbverlauf (b).

Die Berechnung der Isoflächen kann für jedes Gitterelement getrennt ausgeführt werden. Bei Tetraedern mit linearem Ansatz entsteht dabei jeweils ein Drei- oder ein Viereck. Die Isoflächen von Tetraedern mit quadratischem Ansatz können auch ellipsoid-, hyperboloid- oder paraboloidförmig sein und müssen deshalb durch ein oder mehrere ebene Polygone angenähert werden.

Als Beispiel ist in Abb. 6.4 das Potenzial im Substrat unter einem Kontakt mittels Isoflächen dargestellt. Die Farbe der Flächen bezieht sich dabei auf den Wert des Potentials. Da innere Isoflächen in manchen Fällen ganz oder teilweise durch äußere verdeckt werden ist es oft notwendig durch Wegschneiden von Geometrieteilen die Sichtbarkeit zu verbessern.

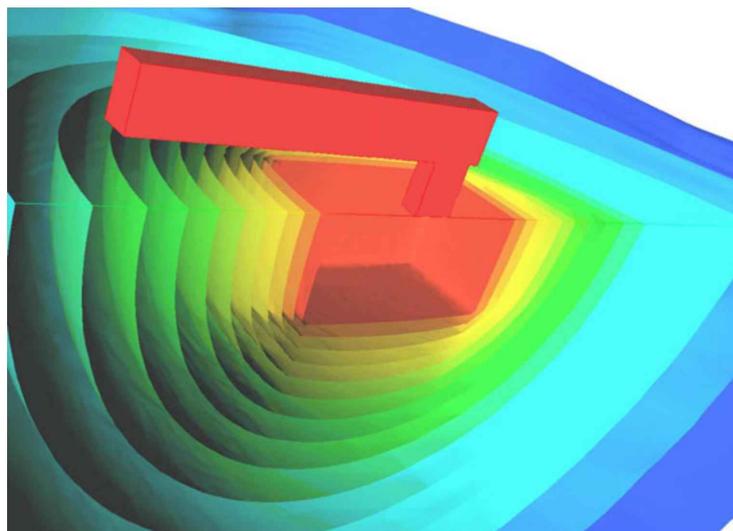


Abbildung 6.4: Darstellung der Potenzialverteilung um einen Substratkontakt mittels Isopotenzialflächen.

6.3 Volumsdarstellung

Dichteverteilungen (z.B. Verlustleistungsdichte, Stromdichte, Konzentrationen) im Inneren eines Körpers können mittels der Volumsdarstellung (Volume-Rendering) visualisiert werden. Ähnlich wie bei einem Röntgenbild wird bei diesem Verfahren die Intensität eines durch den Körper tretenden Lichtstrahls entsprechend der Dichte des Materials abgeschwächt. Die darzustellende Größe wird dazu in einen Koeffizienten für die Lichtdurchlässigkeit umgewandelt. Zusätzlich kann auch eine Farbskala verwendet werden, um die Dichtewerte besser unterscheiden zu können.

Ein Beispiel der Volumsdarstellung ist in Abb. 6.5 gegeben. Es handelt sich hierbei um zwei durch ein Via verbundene stromdurchflossene Leitungen (aus Gründen der Symmetrie wurde nur die halbe Struktur simuliert). Blaue, eher durchscheinende Gebiete repräsentieren Bereiche geringer Stromdichte, dunkelrot bis dunkelgraue Stellen kennzeichnen hohe Stromdichten.

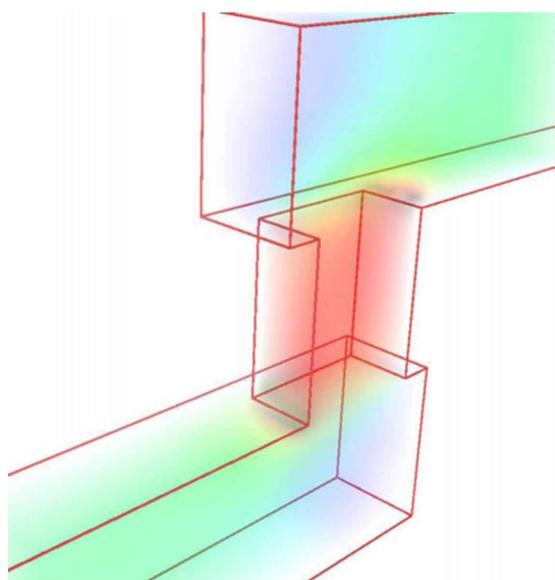


Abbildung 6.5: Volumsdarstellung des Absolutbetrages der Stromdichte in einem Via.

Besonders gut kann man die dreidimensionale Verteilung erkennen, wenn während der Volumsdarstellung das Objekt gedreht wird. Nachteilig wirkt sich der höhere Rechenaufwand aus. Bewegte Darstellungen sehr komplexer Objekte lassen sich deshalb nur mehr bei geringer Auflösung ruckfrei darstellen.

Es gibt drei verschiedene Verfahren zu Volumsdarstellung:

1. Für jedes Pixel wird ein Strahl normal auf die Bildebene (bzw. entsprechend dem verwendeten Projektionsverfahren) gerichtet, mit dem die Dichte des Körpers in regelmäßigen Abständen abgetastet und aufsummiert wird (Raycasting).
2. Man legt durch das Objekt in regelmäßigen Abständen Ebenen, die annähernd parallel zur Bildebene sind und ermittelt den Farb- und Transparenzwert der Punkte der Ebenen durch Interpolation auf dem Objekt. Da die Darstellung durchscheinender Polygone üblicherweise durch geeignete Grafik-Hardware beschleunigt wird, lassen sich damit bewegte Objekte effizient visualisieren. Rotiert man das Objekt jedoch so weit, dass die Ebenen nicht mehr annähernd parallel zur Bildebene sind, müssen neue Ebenen gewählt und erneut interpoliert werden.

3. Die Volumsdarstellung kann durch eine Reihe semitransparenter Isoflächen angenähert werden.

Die Volumsdarstellung wurde hauptsächlich im Bereich der medizinischen Visualisierung verwendet, deshalb sind auch die meisten Implementierungen auf die dort übliche Voxeldarstellung beschränkt. Eine Erweiterung auf unstrukturierte Gitter ist jedoch ohne weiteres möglich (z.B. durch Interpolation).

6.4 Schnittbilder

Schnitte bieten die Möglichkeit Attribute im Inneren des Körpers auf vorgegebenen Ebenen darzustellen. Zur Berechnung der Schnitte kann man nach zwei verschiedenen Strategien vorgehen:

1. Man definiert auf der Schnittebene ein Gitter und interpoliert für jeden Gitterpunkt den Wert der darzustellenden Größe aus der ursprünglichen Struktur.
2. Man führt einen Schnitt für alle Gitterelemente der ursprünglichen Struktur die im Bereich der Schnittebene liegen durch und setzt die erhaltenen Polygone zu einer Ebene zusammen.

In Abb. 6.7 ist die Verlustleistungsdichte im Inneren der in Abb. 6.6 gezeigten Struktur mit Hilfe von acht ebenen Schnitten dargestellt.

6.5 Vektorfelder

Bei verteilten vektoriellen Größen muss zusätzlich zum Betrag auch noch die Richtung des Vektors visualisiert werden. Dies lässt sich bewerkstelligen, indem man in einer Reihe von Testpunkten kleine Symbole (Pfeile, Kegel) anordnet, die in die Richtung des Feldes an diesem Ort weisen und deren Größe (und/oder Farbe) proportional dem Betrag ist. Als Testpunkte wählt man üblicherweise die Gitterknoten oder eine regelmäßige Anordnung von Punkten mit konstanten Abständen in x , y und z Richtung. Abbildung 6.8 zeigt als Beispiel die Stromdichteverteilung in einer Leitungsstruktur mit einem Via.

Eine weitere Möglichkeit zur Visualisierung von Vektorgrößen bietet die Verwendung von Vektorlinien. Sie sind besonders zur Darstellung stationärer Strömungsfelder geeignet. Vektorlinien beschreiben den Weg masseloser Partikel, die durch das Feld bewegt werden. Vektorlinien in einem Vektorfeld $\mathbf{u}(\mathbf{r}(t))$ werden durch folgende gewöhnliche Differentialgleichung beschrieben:

$$\frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{r}(t)). \quad (6.1)$$

Die Gleichung wird gelöst, indem man nach der Variable t mit einer numerischen Methode (z.B. Runge-Kutta) integriert [148]. Für unstrukturierte Gitter wird diese Integration üblicherweise im Einheitsselement ausgeführt. Weiters benötigt man ein Suchverfahren, mit dem die jeweilige Nachbarzelle, in der die Vektorlinie fortgesetzt wird, ermittelt wird.

In Abb. 6.9 ist die gleiche Stromdichteverteilung wie in Abb. 6.8 dargestellt, diesmal jedoch mittels Vektorlinien.

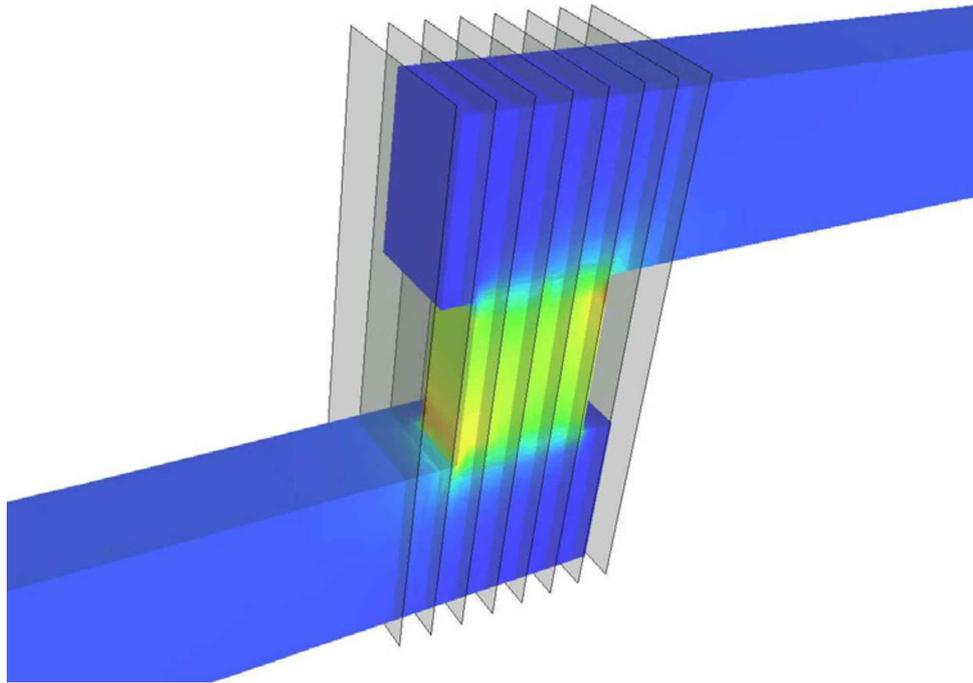


Abbildung 6.6: Verteilung der Verlustleistungsdichte in einer Durchkontaktierung: Um die Verteilung im Inneren betrachten zu können werden acht Schnittebenen definiert.

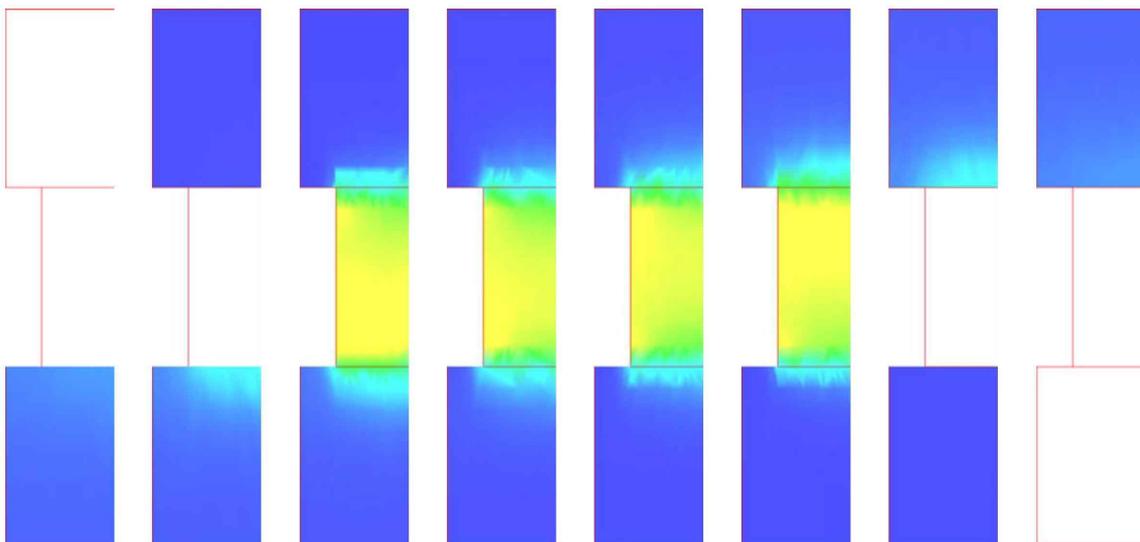


Abbildung 6.7: Visualisierung verteilter Größen durch Schnittbilder

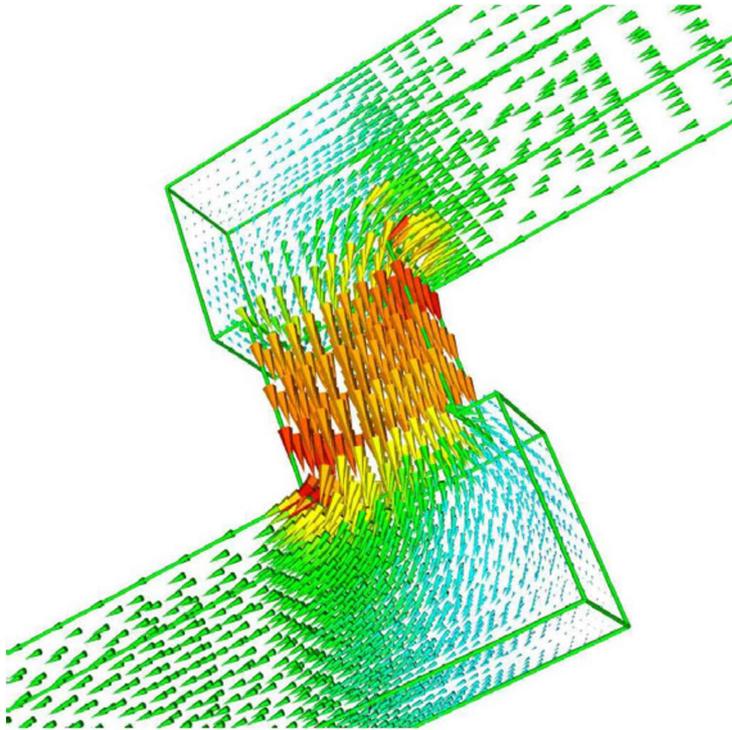


Abbildung 6.8: Visualisierung von Vektorfeldern: Die Richtungspfeile geben Größe und Richtung der Stromdichte an.

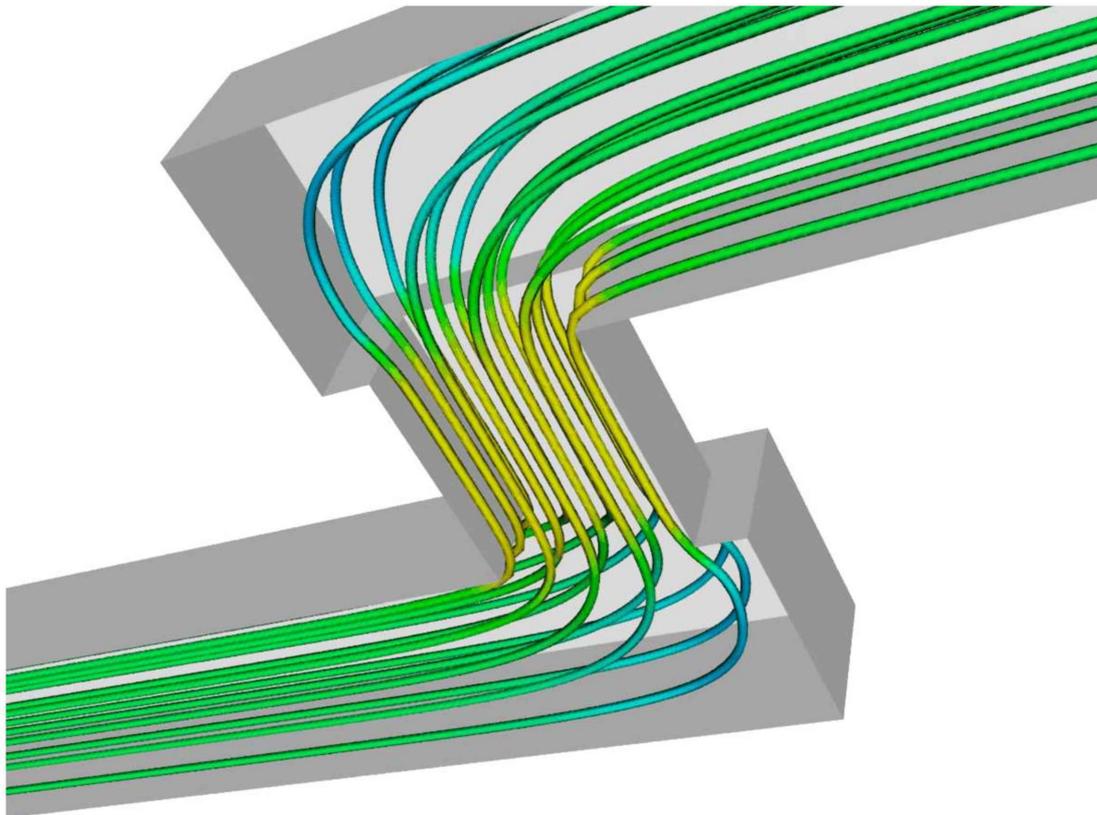


Abbildung 6.9: Visualisierung von Vektorfeldern mittels Vektorlinien

6.6 Gitter

Wenn eine Simulation erfolgreich durchgeführt wurde, so ist man primär an der Darstellung der berechneten Größen interessiert, die Beschaffenheit des Simulationsgitters ist in diesem Fall kaum von Bedeutung. Treten jedoch starke Abweichungen in den Resultaten auf, so können diese Fehler in vielen Fällen auf ein ungeeignetes Simulationsgitter zurückgeführt werden. Die Gittervisualisierung ist deshalb ein sehr hilfreiches Werkzeug zum Auffinden von sowohl numerischen als auch programmiertechnischen Fehlern (debugging).

Die einfachste Art der Gitterdarstellung erreicht man, indem auf der Oberfläche der Struktur die Gitterlinien eingezeichnet werden. Zusätzlich kann die Farbe der Gitterelemente benutzt werden, um eine berechnete Größe darzustellen oder, wie in Abb. 6.10, um das Material anzuzeigen.

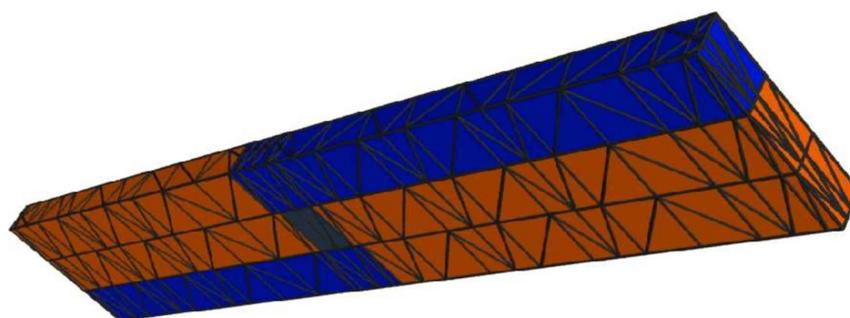


Abbildung 6.10: Visualisierung des Simulationsgitters an der Oberfläche

Um auch das Gitter im Inneren des Körpers betrachten zu können, verwendet man einerseits das „Drahtmodell“, wo anstatt der Gitterelemente lediglich die Gitterkanten dargestellt werden (Abb. 6.11), oder man verkleinert sämtliche Elemente um einen gewissen Faktor und erhält somit durch die entstehenden Zwischenräume einen Einblick auf weiter innen liegende Elemente (Abb. 6.12).

Beide Verfahren werden jedoch unübersichtlich, wenn die Anzahl der Gitterelemente sehr hoch ist. In solchen Fällen ist es dann notwendig, das Gesamtgitter in mehrere Teilbereiche zu zerlegen (z.B. nach Materialien) und diese Teile dann getrennt zu visualisieren.

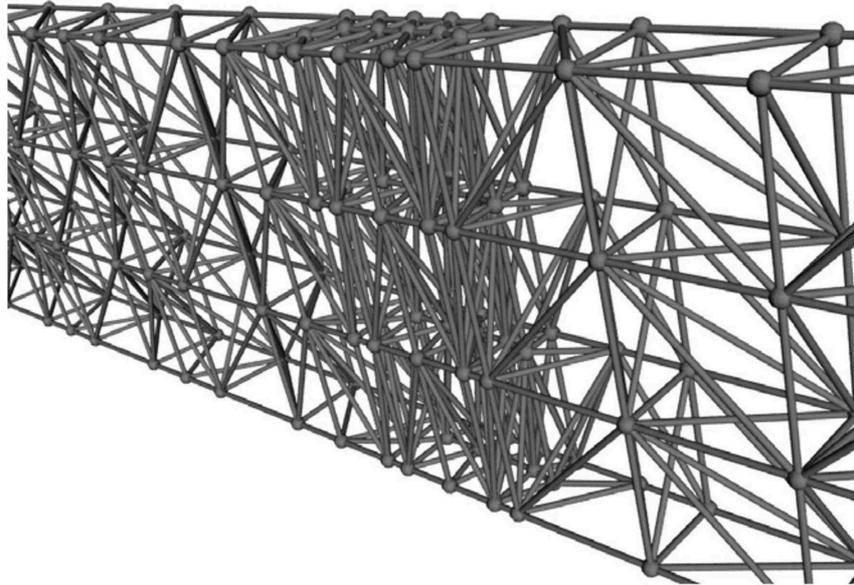


Abbildung 6.11: Visualisierung des Simulationsgitters als Drahtmodell

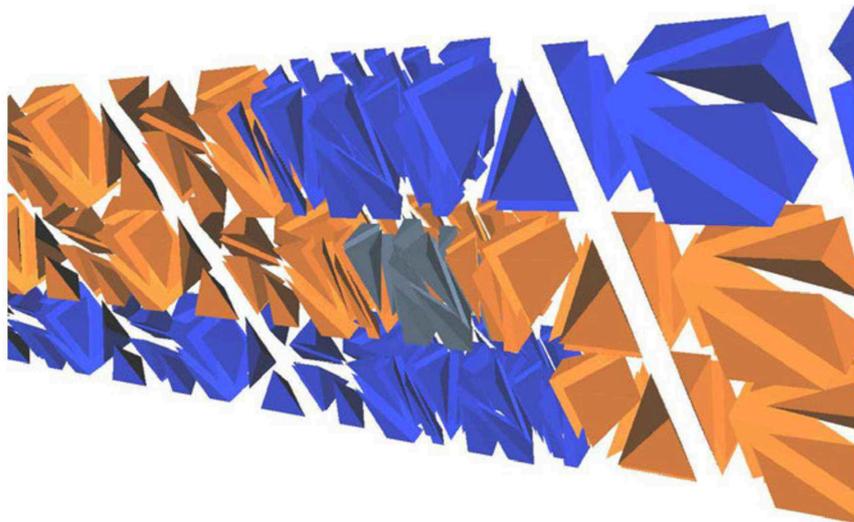


Abbildung 6.12: Visualisierung der Gitterelemente durch Verkleinerung

Kapitel 7

Anwendungen

7.1 Thermische Simulation von Aluminium-Leitern

Die hier simulierte Struktur ist in Abb. 7.1 im Querschnitt dargestellt. Es handelt sich dabei um eine lange gerade Leitung aus einer Legierung von Aluminium mit 5% Kupfer, die mit einem zeitlich konstanten Strom belastet wird. Es soll dabei die durch die elektrische Verlustleistung entstehende Erwärmung untersucht und simuliert mit gemessenen Daten verglichen werden [149].

Dies Gesamtlänge der Leitungen ist $500\ \mu\text{m}$. Es wurden Proben mit unterschiedlichen Leiterbreiten gefertigt, nämlich $0.5\ \mu\text{m}$, $0.95\ \mu\text{m}$, $2\ \mu\text{m}$ und $3\ \mu\text{m}$. Links und rechts der mittleren Leitung befinden sich jeweils zwei stromlose Dummy-Leitungen (nur eine der beiden ist in Abb. 7.1 dargestellt) mit einer Breite von $1.5\ \mu\text{m}$ in einem Abstand von je $0.5\ \mu\text{m}$.

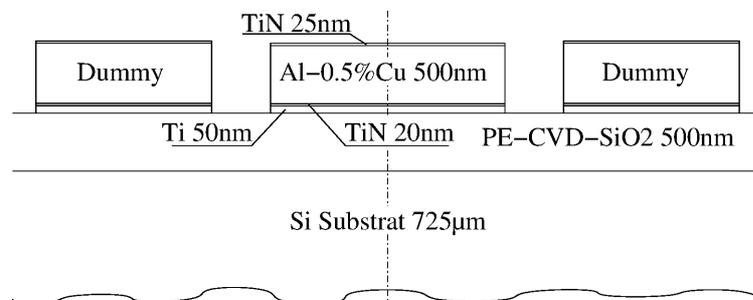


Abbildung 7.1: Querschnitt durch die Teststruktur mit drei Leitungen aus einer Aluminium-Kupfer(5%)-Legierung: Nur die mittlere Leitung ist stromdurchflossen.

Um auch den Einfluss der Passivierungsschicht auf das thermische Verhalten zu untersuchen, wurden die Proben sowohl ohne als auch mit einer $700\ \text{nm}$ dicken SiO_2 -Passivierung (in Abb. 7.1 nicht dargestellt) experimentell gemessen und simuliert. Die bei der Simulation verwendeten Materialparameter sind in Tab. 7.1 angeführt.

Sowohl bei den experimentellen Untersuchungen als auch in der Simulation wurde die mittlere Leitung mit einem Strom I von 5 bis $150\ \text{mA}$ belastet. Die Unterseite des Substrats ist direkt auf einer Metallplatte mit Raumtemperatur (24°C) montiert und wurde in der Simulation durch eine Dirichlet-Bedingung modelliert.

Bei den Messungen wurde die mittlere Temperatur der Leitung indirekt über die an der Leitung anliegenden Spannung U gemessen. Da sich der Widerstand der Leitung mit der Tem-

Tabelle 7.1: Bei den Simulationen verwendete Materialparameter

Material	ρ [$\mu\Omega\text{cm}$]	α [1]	γ_T [$\frac{\text{W}}{\text{mK}}$]
AlCu	3.0	0.0042	238.0
Ti	60.0	0.0041	15.0
TiN	600.0	0.0041	10.0
W	10.0	0.0038	140.0
Si			84.0
SiO ₂			1.4
Luft			0.023

peratur verändert, kann die Leitertemperatur folgendermaßen ermittelt werden

$$T = T_0 + \frac{1}{\alpha} \left(\frac{U}{R_0 I} - 1 \right), \quad (7.1)$$

wobei T_0 die Referenztemperatur von 24°C ist und R_0 der Widerstand der Leitung bei dieser Temperatur.

Obwohl das Si-Substrat ein sehr guter Wärmeleiter ist und direkt auf einer Metallplatte mit konstanter Temperatur angebracht ist, ergibt sich aufgrund der verhältnismäßig großen Dicke ein nicht zu vernachlässigender Wärmewiderstand. Das Substrat muss deshalb in die Simulation mit einbezogen werden. Aufgrund der Symmetrie reicht es aber aus, lediglich die Hälfte der Struktur zu berechnen.

In Abb. 7.2 ist die Temperatur auf dem gesamten Simulationsgebiet dargestellt. Die (halbe) Al-Leitung befindet sich (kaum erkennbar) in der linken oberen Ecke. Man erkennt hier, dass die Erwärmung weit in das Substrat hineinreicht und deshalb auch das Simulationsgebiet derartig groß gewählt werden musste. Würde man beispielweise die Abmessungen des Simulationsbereiches auf die Hälfte reduzieren, würde der untere Rand die 5%-Isothermenlinie schneiden und ein um etwa 5% größerer Simulationsfehler wäre zu erwarten.

Die Oberfläche der Teststruktur ist direkt der Umgebungsluft ausgesetzt. In der Simulation ist eine solche Randbedingung schwierig zu modellieren, da in Gasen Konvektion als dominierender Wärmetransportmechanismus vorherrscht. Konvektion kommt entweder durch eine extern verursachte Luftströmung zustande (z.B. Gebläse) oder durch Erwärmung. Da im Experiment die Teststruktur keiner externen Luftströmung ausgesetzt und in waagrechter Position montiert ist, kann man davon ausgehen, dass die Luftbewegung an der Oberfläche sehr gering ist und deshalb vernachlässigt werden kann. Diese Annahme wird durch die Messdaten, die einen quadratischen Anstieg der Temperatur mit dem Strom aufweisen, bestätigt. Im Falle thermischer Konvektion müssten Abweichungen von diesem quadratischen Verlauf im oberen Temperaturbereich erkennbar werden, was hier nicht der Fall ist.

In der Simulation ist deshalb ein einfaches Modell für den oberen Rand ausreichend (hier eine 1 μm starke Schicht aus Luft).

Vergößerte Ausschnitte des Bereiches um die Al-Leitung sind in Abb. 7.3 zu sehen. Man erkennt hier, dass die Temperatur über den Querschnitt der aktiven Leitung annähernd konstant ist und deshalb auch die Annahme einer konstanten mittleren Temperatur für die Widerstandsberechnung gerechtfertigt ist.

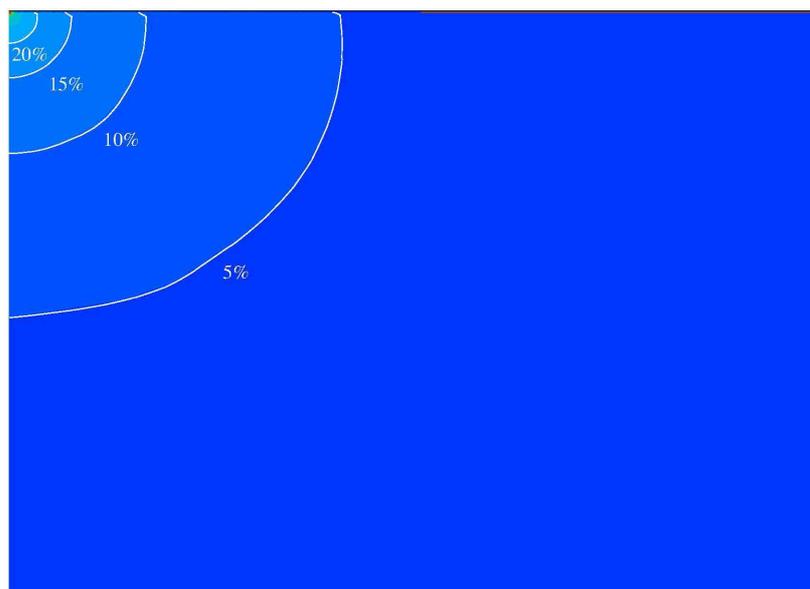


Abbildung 7.2: Temperaturverteilung am Querschnitt durch das komplette Simulationsgebiet (Farbskala siehe folgende Abbildung). Die Beschriftungen an den Isothermenlinien sind Prozentangaben bezogen auf das Temperaturmaximum. Die Knicke in den Isolinien sind durch das relativ grobe Gitter im Substrat verursacht. Aufgrund der Symmetrie wurde die Simulation nur für die rechte Hälfte durchgeführt.

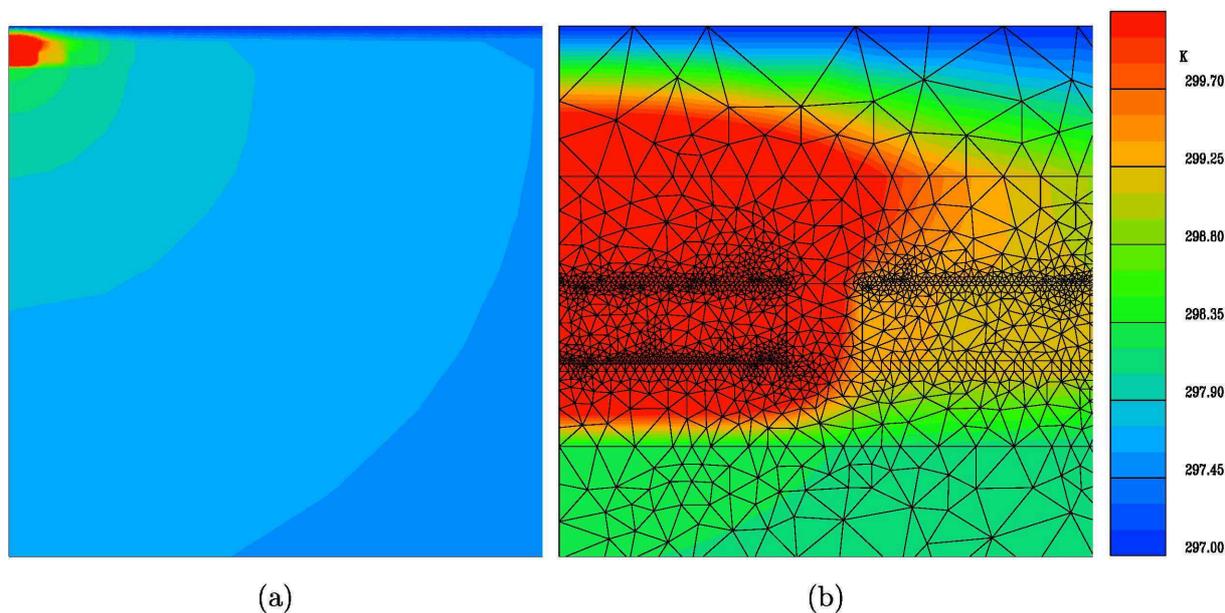


Abbildung 7.3: Temperaturverteilung im Detail: (a) zeigt die nähere Umgebung um die Leitung, in (b) wurde noch weiter vergrößert, sodass man anhand der Gitterlinien die (halbe) aktive Leitung sowie einen Teil der benachbarten Dummy-Leitung erkennen kann.

Die in Tab. 7.1 angegebene thermische Leitfähigkeit gilt für reines SiO_2 in kristalliner Struktur. Da das mit den hier verwendeten Depositionsprozessen aufgebraute SiO_2 diese Dichte nicht ganz erreicht wird, ist der tatsächliche Wert der thermischen Leitfähigkeit um einige Procente geringer. Deshalb wurden die thermischen Leitfähigkeiten für PE-CVD SiO_2 und thermisches SiO_2 in einer Optimierungsschleife angepasst bis die Unterschiede zwischen Simulation und Experiment ein Minimum aufwies. Es ergaben sich $1.3 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$ für das PE-CVD SiO_2 und $1.2 \frac{\text{W}}{\text{mK}}$ für die Passivierungsschicht. Die Ergebnisse der Simulationen unter Verwendung der beiden optimierten thermischen Leitfähigkeiten sind in Abb. 7.4 für die Struktur ohne Passivierung und in Abb. 7.5 für die Struktur mit Passivierung dargestellt.

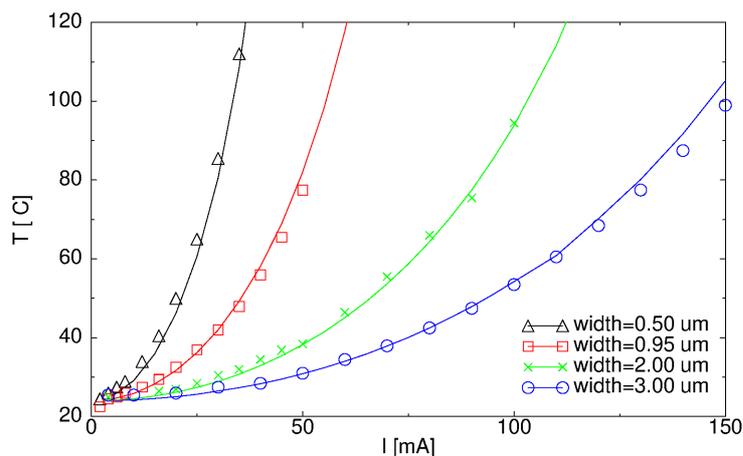


Abbildung 7.4: Simulierte (Linien) und gemessene (Symbole) Temperatur für die Teststruktur ohne Passivierung.

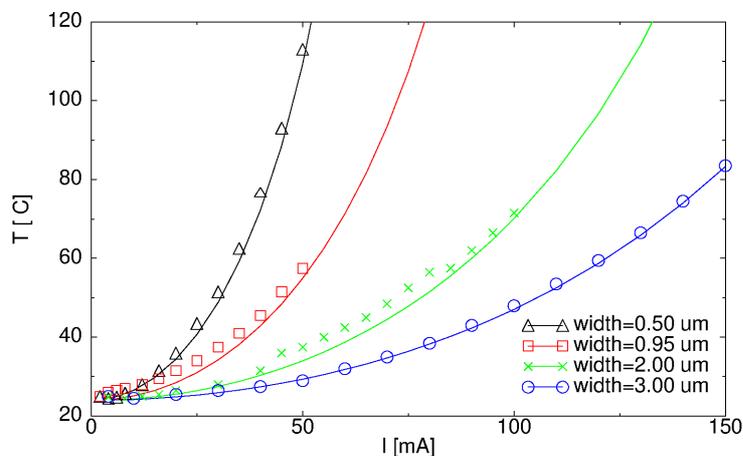


Abbildung 7.5: Simulierte (Linien) und gemessene (Symbole) Temperatur für die Teststruktur mit Passivierung.

Wie die beiden Abbildungen zeigen, konnte eine hervorragende Übereinstimmung zu den Messdaten (Fehler in der Größenordnung der Messgenauigkeit) erzielt werden.

7.2 Auswirkung einer Leitungseinengung

Durch Elektromigration können Leerräume und Leitungseinengungen entstehen (siehe auch Abb. 1.4a). Um zu untersuchen, wie sich diese Erscheinungen auf den elektrischen Widerstand der Leitung, die Stromdichteverteilung und lokale Erwärmung auswirken, wird eine Reihe von Simulationen durchgeführt. Dazu wird die folgende Teststruktur gewählt (Abb. 7.6).

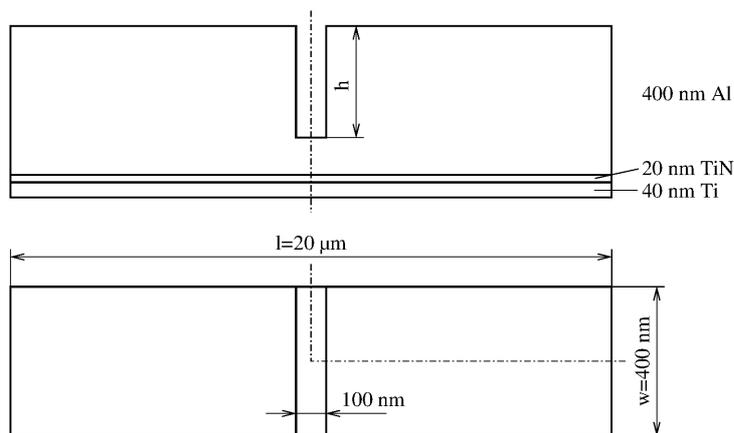


Abbildung 7.6: Testleitung mit schlitzförmiger Einengung

Da diese Struktur zwei Symmetrieebenen aufweist, muss lediglich ein Viertel der Anordnung simuliert werden. In Abb. 7.6 ist der Simulationsbereich durch eine strichpunktierte Linie markiert. Der Simulationsbereich umfasst außerdem noch das Oxid, das die Leitung umgibt, sowie einen Teil des Silizium-Substrats (der in der Abbildung nicht dargestellt ist).

Für die Simulation wurde ein Gitter mit 34920 Tetraederelementen mit quadratischen Ansatzfunktionen benutzt. Die Anzahl der Gitterknoten betrug 44286.

Analyse der Stromverteilung

Vorerst soll die Erwärmung durch die Verlustleistung außer Acht gelassen werden und ausschließlich das elektrische System betrachtet werden. Im folgenden Beispiel wurde die Tiefe der Leitungseinengung h mit 200 nm angenommen und die Leitung mit einem Strom von 1 mA belastet. Die Verteilung der Stromdichte ist in Abb. 7.7 auf der Oberfläche des simulierten Viertels dargestellt.

Man erkennt hier, dass der Betrag der Stromdichte an der unteren Kante des Einschnittes sehr hoch wird. Die exakte Lösung der Laplace-Gleichung weist an einspringenden Kanten eine Singularität in der Stromdichte auf. Durch die in der Finite Elemente Methode getroffene Formulierung der Näherungslösung mit linearen bzw. quadratischen Ansatzfunktionen können jedoch im Gradienten des Potentials keine Singularitäten auftreten und es ergibt sich für die Stromdichte an einer einspringenden Kante immer ein zwar recht hoher, aber dennoch endlicher Wert. Je feiner man das Simulationsgitter in der Umgebung der Kante wählt, desto genauer kann man die exakte Lösung in diesem Bereich approximieren und desto höher wird auch der errechnete Spitzenwert der Stromdichte. In diesem Beispiel ergibt die Simulation ein Maximum von 6.39 MA/cm^2 . Mit einem etwas gröberen Gitter wurden 4.52 MA/cm^2 und mit einem etwas feineren 7.92 MA/cm^2 errechnet. An solchen singulären Stellen kann man also durch Wahl eines entsprechend feinen Gitters jede beliebig hohe Stromdichte als Ergebnis erhalten. Durch FEM-Berechnungen gewonnene Aussagen über maximale Stromdichten bei Geometrien mit einspringenden Kanten (die teilweise in der Literatur zu finden sind, z.B. [150]) sind deshalb mit sehr großer Vorsicht zu genießen.

Um die Singularität der Stromdichte genauer zu untersuchen, wird im Folgenden eine analytische Lösung der Laplace-Gleichung in zwei Dimensionen abgeleitet. Abbildung 7.8 zeigt das Gebiet, für das die Lösung hergeleitet werden soll. Die beiden Ränder stellen für das elektrische Potenzial φ homogene Neumann-Bedingungen dar. Ferner lässt sich zeigen, dass aus Gründen

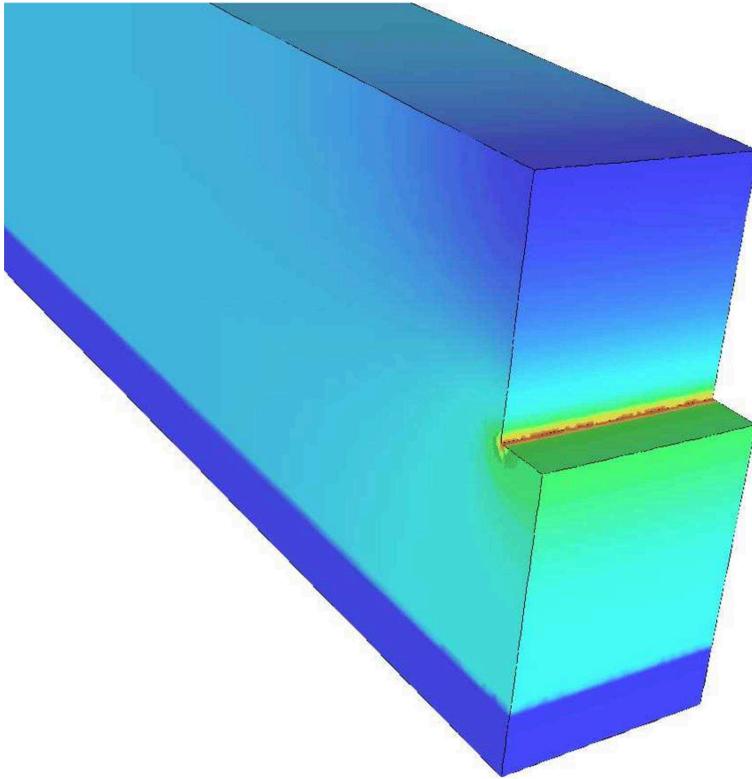


Abbildung 7.7: Betrag der Stromdichte auf der Oberfläche der Leitung in der Umgebung der Einengung.

der Symmetrie das Potenzial entlang der strichpunktiert eingezeichneten Linie konstant ist. Man kann deshalb ohne Beschränkung der Allgemeinheit dort eine homogene Dirichlet-Bedingung annehmen und die Berechnung auf das halbe Gebiet reduzieren.

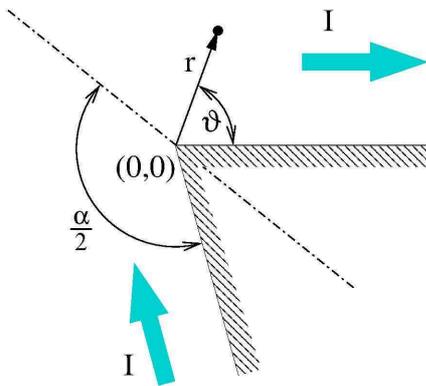


Abbildung 7.8: Die Laplace-Gleichung soll für den Strom I , der um eine einspringende Ecke fließt analytisch in Polarkoordinaten gelöst werden. Die beiden schraffierten Kanten stellen homogene Neumann-Bedingungen dar.

Homogene Leitfähigkeit vorausgesetzt, kann das Potenzial φ durch die Laplace-Gleichung beschrieben werden, die in Polarkoordinaten wie folgt angeschrieben werden kann:

$$\Delta\varphi(r, \vartheta) = \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2\varphi}{\partial\vartheta^2} = 0. \quad (7.2)$$

Man führt einen Separationsansatz durch, wobei φ durch eine radiale und eine winkelabhängige Komponente ausgedrückt wird:

$$\varphi(r, \vartheta) = R(r) \cdot \Theta(\vartheta). \quad (7.3)$$

Eingesetzt in (7.2) erhält man nach Umformung

$$r^2 \frac{R''}{R} + r \frac{R'}{R} = -\frac{\Theta''}{\Theta} = a, \quad (7.4)$$

wobei a eine vorerst beliebig wählbare Konstante ist. Die Gleichung lässt sich in Teile für R und Θ aufspalten, die über a gekoppelt sind. Für den radialen Term erhält man somit folgende gewöhnliche Differentialgleichung

$$r^2 R'' + r R' = a R, \quad (7.5)$$

deren Lösung

$$R(r) = k_1 r^{\pm\sqrt{a}} \quad (7.6)$$

ist, dabei ist k_1 eine beliebige Konstante. Damit man eine reelle Lösung erhält, muss $a \geq 0$ gelten. Für den winkelabhängigen Term lautet die Differentialgleichung

$$\Theta'' + a\Theta = 0, \quad (7.7)$$

deren Lösung

$$\Theta = k_2 \sin(\sqrt{a}(\theta - \delta)) \quad (7.8)$$

ist, wobei k_2 und δ beliebige Konstanten sind. Kombiniert man (7.6) und (7.8) und führt zur Vereinfachung die Variable $b = \sqrt{a}$ ein erhält man als Lösungsraum der Laplace-Gleichung eine Schar von Funktionen

$$\varphi(r, \theta) = k r^b \sin(b(\theta - \delta)) \quad (7.9)$$

mit k , b , und δ als Parameter. Für die Einhaltung der Neumann-Bedingung an der Stelle $\theta = 0$ ist

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial \theta} \right|_{\theta=0} = -k b r^b \cos(b(\theta - \delta)) = 0 \quad (7.10)$$

gefordert, woraus sich folgende Bedingung ergibt:

$$b\delta = \frac{\pi}{2} + m\pi \quad m \in \mathbb{Z}. \quad (7.11)$$

Für die Einhaltung der Dirichlet-Bedingung ist an der Stelle $\theta = \alpha/2$

$$\varphi|_{\theta=\alpha/2} = k r^b \sin\left(b\left(\frac{\alpha}{2} - \delta\right)\right) = 0 \quad (7.12)$$

gefordert. Deshalb muss zusätzlich zu (7.11) noch

$$b\left(\frac{\alpha}{2} - \delta\right) = p\pi \quad p \in \mathbb{Z} \quad (7.13)$$

erfüllt sein, woraus folgende Bedingung für b resultiert:

$$b = \frac{\pi}{\alpha}(1 + 2n) \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (7.14)$$

Die Tatsache, dass in (7.14) nur mehr positive Werte für b erlaubt sind, rührt daher, dass das Potenzial im Ursprung ($r = 0$) wegen der Dirichlet-Bedingung einen Wert von Null haben muss und deshalb in (7.9) keine Singularität auftreten darf.

Nun kann der Betrag der Stromdichte berechnet werden. Sie setzt sich aus Termen der folgenden Form zusammen

$$J_n = \gamma |\text{grad } \varphi| = \gamma k b r^{b-1}, \quad (7.15)$$

wobei für b entsprechend (7.14) eingesetzt wird. Eine Singularität ($b < 1$) kommt nur für $n = 0$ und einen Winkel α zwischen π und 2π zustande und hat die Form:

$$J_0 = \gamma k \frac{\pi}{\alpha} \cdot \frac{1}{r^{1-\pi/\alpha}}. \quad (7.16)$$

In Abb. 7.9 wurde die Stromdichte in einer zweidimensionalen FEM-Simulation um eine 270°-Kante berechnet und mittels Isolinien dargestellt. Die Gitterdichte wurde im Bereich der Singularität extrem hoch gewählt. Es ergab sich eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Simulation und analytischer Berechnung für all jene Gitterpunkte, die mehr als zwei Gitterelemente von der Singularität entfernt liegen (Fehler unter 1%).

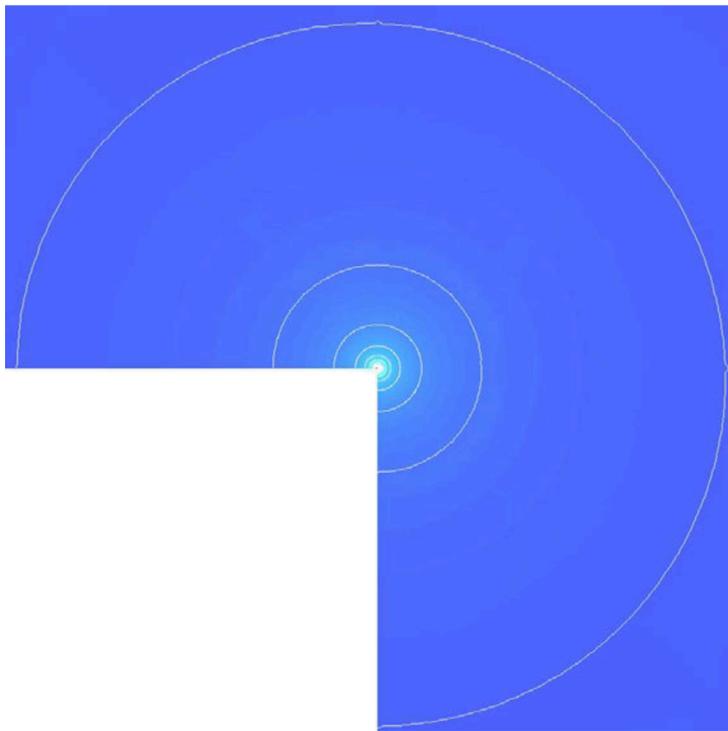


Abbildung 7.9: Der Betrag der Stromdichte an einer Ecke: Bei Winkeln größer als 180° entsteht eine Singularität.

Thermische Analyse

Inwieweit eine Leitungseinengung eine Erhöhung von Leitungswiderstand und Temperatur verursacht, soll hier in einer gekoppelt elektro-thermischen Simulation untersucht werden. Der Strom wurde dabei konstant 10 mA gewählt (entspricht einer Stromdichte von 13 MA/cm² im vollen Leiterquerschnitt) und die Tiefe der Einengung wurde variiert. Die Temperaturverteilung in der Nähe der Einengung ist für $h = 380$ nm in Abb. 7.10 dargestellt.

Wie sich der Widerstand und die maximale Temperatur verhalten ist aus Abb. 7.11 zu entnehmen. Man kann hier einen sehr steilen Anstieg des Widerstandes und der Temperatur erkennen, wenn die verbleibende Leitungsdicke sehr dünn wird. Es ist naheliegend anzunehmen,

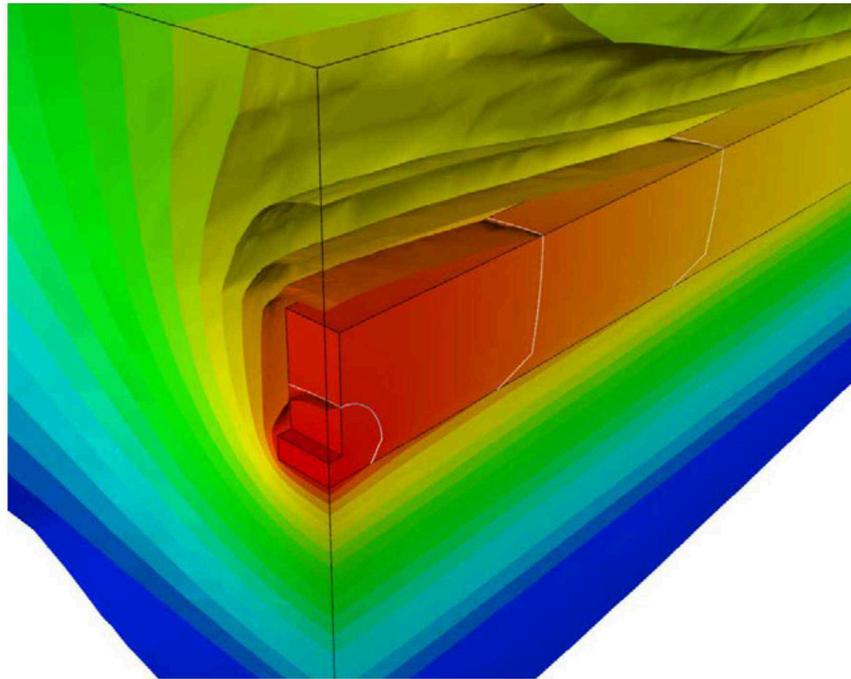


Abbildung 7.10: Temperaturverteilung im Bereich der Leitungseinengung: Die maximale Temperatur beträgt 33°C , der Unterschied zwischen den Isothermenflächen ist jeweils 2°C .

dass Temperatur und Widerstand gegen Unendlich streben, wenn die verbleibende Leitungsdicke gegen Null geht. Da aber der spezifische Widerstand des Leiters einen positiven Temperaturkoeffizienten besitzt, kann man mit folgender Abschätzung zeigen, dass mit dem hier verwendeten Leitfähigkeitsmodell schon bei einer endlichen Leitungsdicke Temperatur und Widerstand gegen Unendlich streben. Dazu soll der Bereich unterhalb der Einengung betrachtet werden. Die Temperatur im Metall kann hier aufgrund der guten Wärmeleitfähigkeit als konstant angenommen werden. Ferner wird angenommen, dass die Wärmeleitwerte aller vorkommenden Materialien nicht von der Temperatur abhängig sind. Die Temperatur T in der Leitung steht damit in linearem Zusammenhang mit der elektrischen Verlustleistung P

$$T = R_{\text{th}}P, \quad (7.17)$$

wobei sich die Verlustleistung aus dem Strom und Widerstand der Leitung berechnen lässt:

$$P = I^2R. \quad (7.18)$$

Der Widerstand ist in erster Näherung verkehrt proportional zur verbleibenden Leitungsdicke x und steigt durch den Temperaturkoeffizienten α mit zunehmender Temperatur linear an:

$$R = kx(1 + \alpha T). \quad (7.19)$$

Aus (7.17) bis (7.19) lässt sich die Temperatur ausdrücken

$$T = \frac{I^2 R_{\text{th}} k x}{1 - \alpha I^2 R_{\text{th}} k x}, \quad (7.20)$$

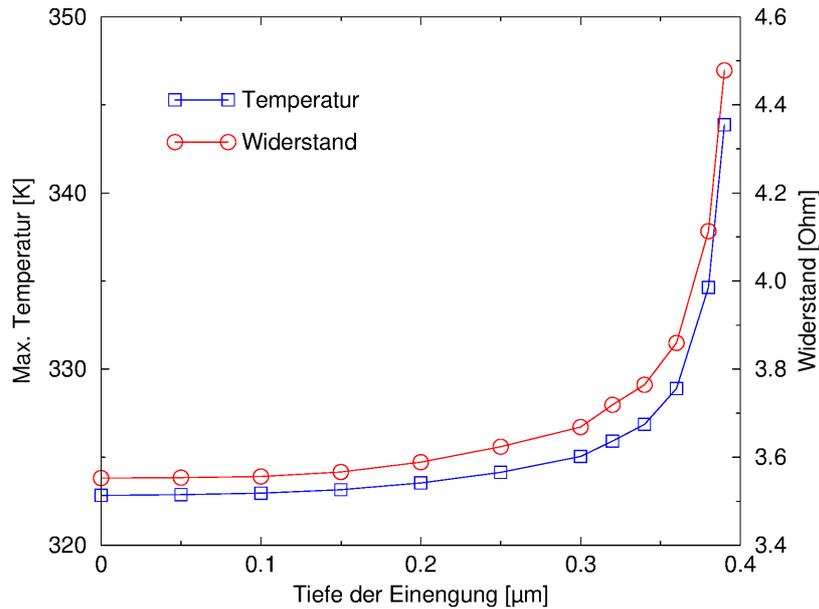


Abbildung 7.11: Der Widerstand der Leitung und die maximale Temperatur steigen mit der Größe der Einengung an.

die eine Polstelle bei einer Leitungsdicke x größer Null

$$x = \frac{1}{\alpha I^2 R_{th} k} \quad (7.21)$$

aufweist, wodurch obige Behauptung bewiesen wäre. Jenseits dieser Grenze hat das Problem keine physikalisch interpretierbare Lösung mehr. In der Simulation wird ein solcher Fall durch ausbleibende Konvergenz in der Relaxationsschleife zur Lösung nichtlinearer Probleme erkannt.

Je weiter man sich dieser Grenze nähert, desto größer wird die Sensibilität für numerische Fehler. Dieser Effekt wird noch verstärkt, wenn in dem kritischen Bereich Singularitäten in der Stromdichte auftreten. Um trotzdem genaue Resultate zu erhalten, ist es unbedingt notwendig in solchen Bereichen die Gitterdichte genügend hoch zu gestalten.

Zum Abschluss dieses Beispiels soll noch überprüft werden, wie aussagekräftig die berechneten Temperaturmaxima sind. Wie bei der Analyse der Stromdichteverteilung gezeigt wurde, hat der errechnete Maximalwert der Stromdichte an einspringenden Kanten wegen der dort auftretenden Singularität keine Aussagekraft. Aus der Singularität in der Stromdichteverteilung resultiert folglich auch eine Singularität der Verlustleistungsdichte p :

$$p = \frac{1}{\gamma} J^2 = \gamma \left(\frac{\pi}{\alpha} \right)^2 r^{2\pi/\alpha - 2}. \quad (7.22)$$

Da die Verlustleistung in der Wärmeleitungsgleichung als Quellterm aufscheint, stellt sich nun die Frage, ob dadurch auch eine Singularität in der Lösung bewirkt wird. Im Folgenden soll durch eine Abschätzung eine Antwort auf diese Frage gefunden werden. Dazu betrachtet man die stationäre Wärmeleitungsgleichung (Poisson-Gleichung) unter Voraussetzung homogenen Materials mit obigem Ausdruck für die Verlustleistung:

$$\Delta T = kr^{2\pi/\alpha - 2} = g. \quad (7.23)$$

Alle Konstanten wurden hierbei im Faktor k zusammengefasst. Laut dem Green'schen Theorem erhält man die Lösung der Poisson-Gleichung in integraler Form als

$$T(\mathbf{r}') = \int_A \frac{g(\mathbf{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dA . \quad (7.24)$$

Da die Singularität im Ursprung liegt, ist man lediglich an dieser Stelle am Wert der Temperatur interessiert:

$$T(\mathbf{0}) = \int_A \frac{g(\mathbf{r})}{|\mathbf{r}|} dA = k \int_A r^{2\pi/\alpha-3} dA . \quad (7.25)$$

Für die Integration wird das Flächenintegral in ein Doppelintegral über den Winkel θ und den Radius r umgewandelt. Der Bereich für θ geht von 0 bis α . In radialer Richtung wird von $h \rightarrow 0$ bis H integriert. H hat einen endlichen Wert, wie groß dieser tatsächlich ist, ist hier nicht von Bedeutung, da damit lediglich die Begrenztheit des Bereiches ausgedrückt werden soll.

$$\begin{aligned} T(\mathbf{0}) &= k \lim_{h \rightarrow 0} \int_h^H \int_0^\alpha r^{2\pi/\alpha-3} r d\theta dr \\ &= \frac{k\alpha}{2\pi/\alpha - 2} \left(H^{2\pi/\alpha-1} - \lim_{h \rightarrow 0} h^{2\pi/\alpha-1} \right) . \end{aligned} \quad (7.26)$$

Nun kann der Grenzübergang $h \rightarrow 0$ ausgeführt werden. Man erkennt, dass unter der Bedingung $\alpha < 2\pi$ der Wert der Temperatur endlich bleibt. Da diese Bedingung immer erfüllt ist, kann daraus geschlossen werden, dass trotz der Singularität in der Stromdichteverteilung, die numerische Berechnung der Temperatur einen Fehler liefert, der beliebig klein gemacht werden kann, indem man die Gitterdichte entsprechend erhöht.

7.3 Widerstandsberechnung von Vias in Cu-DD Architektur

Ein nicht zu vernachlässigender Beitrag zum Gesamtwiderstand einer Verbindungsleitung wird durch die Durchkontaktierungen (Vias) zwischen den Metallisierungsebenen verursacht. In diesem Beispiel wird deshalb der Widerstand von mehreren Vias unterschiedlichen Querschnitts in Kupfer-Dual-Damascene Architektur berechnet und gezeigt, wie er von der Dicke der Barrierschicht abhängt. Für Messungen von Via-Widerständen verwendet man zwecks Verringerung des Messfehlers üblicherweise eine Kette einiger hundert hintereinandergereihter Vias. Abbildung 7.12 zeigt einen Teil einer solchen Kette von Durchkontaktierungen mit einem Querschnitt von $0.4 \times 0.4 \mu\text{m}$. Da diese Struktur periodisch fortgesetzt ist, reicht die Simulation eines einzelnen Vias aus. Der Simulationsbereich wird durch die Symmetrieebenen begrenzt. In Abb. 7.13 ist ein Via im Querschnitt dargestellt.

Das für die Simulationen dieser Struktur erzeugte Gitter hat 441945 Tetraederelemente mit quadratischem Ansatz und 604668 Knoten (Gesamtbereich für die elektro-thermische Simulation).

Die erwartete starke Abhängigkeit des Via-Widerstandes von der Dicke der schlecht leitenden Barrierschicht wurde durch die Simulation bestätigt. Die Ergebnisse sind in Abb. 7.14 dargestellt. Je kleiner der Querschnitt der Durchkontaktierung ist, desto stärker ist auch der Einfluss der Barrierschicht auf den Widerstand.

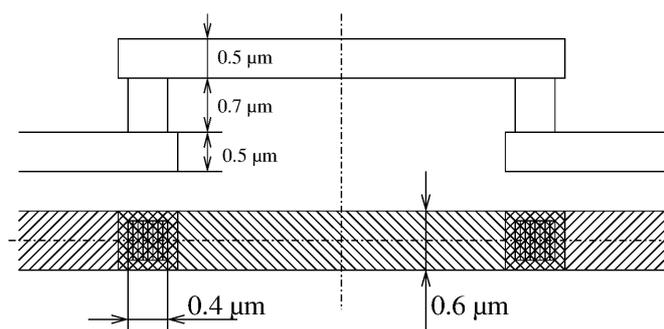


Abbildung 7.12: Kette von Cu Vias

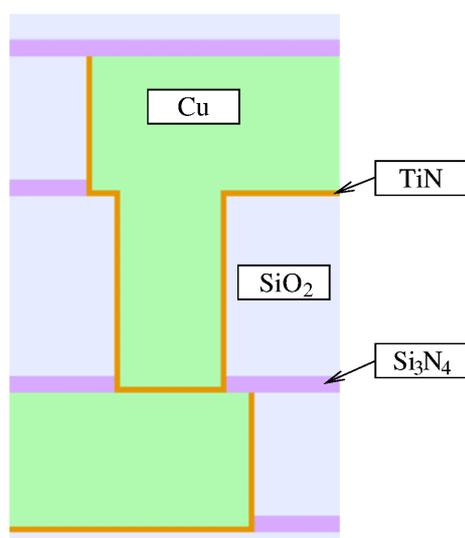


Abbildung 7.13: Ein Via in Cu-Dual-Damascene Architektur im Querschnitt

Ein Vergleich mit Messdaten [26] zeigt für den Fall einer 20 nm starken Barrierschicht einen um 30% höheren Widerstand als berechnet. Dieser erhöhte Messwert lässt vermuten, dass die Übergänge von Cu auf TiN einen zusätzlichen Widerstand bewirken. Bei Vias ohne einer TiN Barriere liegen die gemessenen und simulierten Werte nur wenige Prozent auseinander.

Abschließend wurde noch eine gekoppelt elektro-thermische Simulation der Struktur mit 20 nm TiN-Barriere durchgeführt. Dabei wurde ein Strom von 13.4 mA an den beiden Enden der Leitung angelegt, das bedeutet eine Stromdichte von etwa 8.5 MA/cm^2 im Zentrum des Vias. Die Unterseite des Si-Substrates wurde dabei konstant auf 24°C gehalten.

Abbildung 7.15 zeigt die Stromdichte auf der Oberfläche der simulierten Struktur. Der hohe Widerstand der TiN-Barriere bewirkt eine fast gleichmäßige Verteilung der Stromdichte am Übergang zwischen unterem Leiter und Via. Die höchste Stromdichte kann man an der rechten Ecke im oberen Bereich des Vias erkennen. Dieser Bereich ist deshalb am meisten elektromigrationsgefährdet, da hier gleichzeitig auch erhöhte Temperatur auftritt. Allerdings wird die Stromdichte an dieser Stelle durch die Simulation etwas überschätzt, da bei üblichen Herstellungsprozessen anstatt der hier angenommenen scharfen Kante eine Abrundung entsteht.

Die Temperaturverteilung am Querschnitt durch die Via-Struktur ist in Abb. 7.16 dargestellt. Das Temperaturmaximum von 91°C wird auf der Unterseite des Vias erreicht; dort hat auch die Verlustleistung aufgrund des hohen Widerstandes der TiN-Schicht ein Maximum.

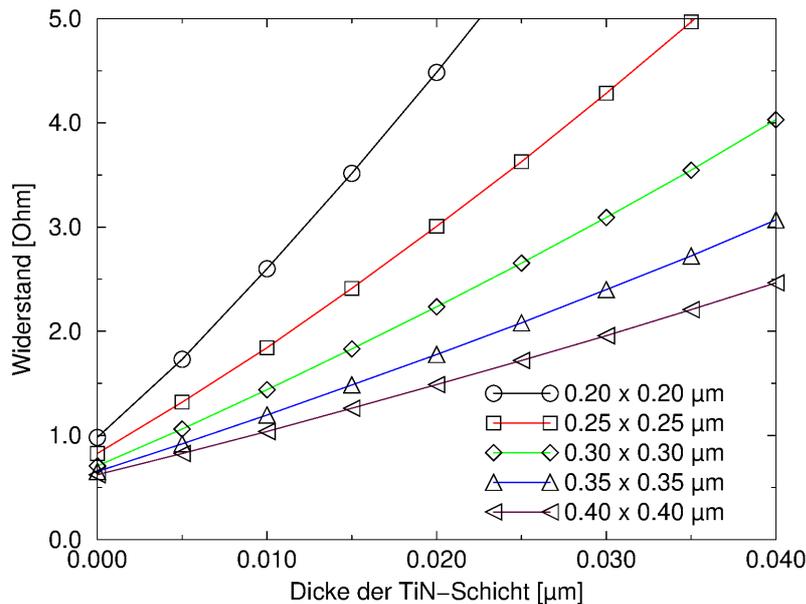


Abbildung 7.14: Widerstand von Vias mit verschieden großem Querschnitt bei Raumtemperatur. Bei kleiner TiN Schichtdicke ist die Abhängigkeit nahezu linear.

7.4 Transiente Simulation eines Polysilizium-Widerstandes

Die Polysilizium-Schicht kann nicht nur für die Gate-Anschlüsse von Transistoren und lokale Verbindungen genutzt werden, sie eignet sich auch zur Herstellung von integrierten Widerständen. Je geringer die Dotierung, desto höher wird ihr spezifischer Widerstand. In diesem Beispiel wird ein Schichtwiderstand von $2000 \Omega/\square$ angenommen. Für gewisse Anwendungen ist es notwendig, zwei Widerstände mit exakt gleichem Wert zur Verfügung zu haben (z.B. in Operationsverstärkern). Dabei ist es notwendig, dass thermische Einflüsse auf beide Widerstände in gleicher Art einwirken, weshalb ihr Abstand möglichst gering sein muss. Dadurch kommt es aber zu einer erhöhten kapazitiven Kopplung und Übersprechen kann zu einem Problem werden. Ein solches Widerstandspaar wird deshalb in diesem Beispiel (Abb. 7.17) mittels transientser FEM-Simulation analysiert und die Ergebnisse mit den Resultaten eines Schaltungssimulators [151] verglichen. Die beiden Polysilizium-Leitungen sind jeweils $1 \mu\text{m}$ breit und haben eine Gesamtlänge von $171 \mu\text{m}$.

Als erster Schritt wurden die Widerstände und Kapazitäten dieser Struktur extrahiert. Dazu wurde das darunter liegende Si-Substrat als idealer Leiter angenommen. Folgende Werte wurden berechnet: $R_1 = R_2 = 3.34 \text{ k}\Omega$, $C_{1,\text{gnd}} = 19.0 \text{ fF}$, $C_{2,\text{gnd}} = 19.4 \text{ fF}$, $C_{1,2} = 5.0 \text{ fF}$.

Anschließend wurde eine transiente Simulation durchgeführt. Da hier aufgrund der schlechten Leitfähigkeiten die elektrischen Ströme gering sind und induktive Effekte kaum einen Einfluss haben, kann mittels quasi-elektrostatistischer Näherung ein ausreichend genaues Ergebnis erzielt werden. Dazu wurde ein Simulationsgitter mit 21294 Tetraederelementen mit quadratischen Ansatzfunktionen und 34920 Gitterknoten erzeugt.

In dieser Simulation wurde am linken Anschluss eines Widerstandes zum Zeitpunkt $t = 0$ ein Spannungssprung von 1 V angelegt. Der linke Anschluss des anderen Widerstandes wurde auf Massepotenzial gelegt. Die beiden rechten Kontakte der Widerstände wurden zunächst offen gelassen und die Spannung beobachtet (Leerlauf). Das Substrat wurde dabei weiterhin als ideale Massefläche angenommen. Dabei lässt sich eine Verzögerungszeit von 106 ps beobachten, bis am

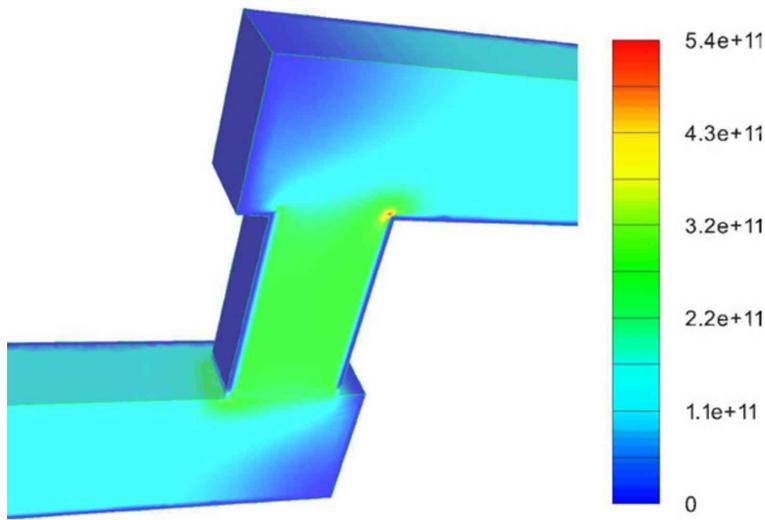


Abbildung 7.15: Betrag der Stromdichte auf der Oberfläche eines in der Hälfte (Symmetrieebene) aufgeschnittenen Vias in A/m^2

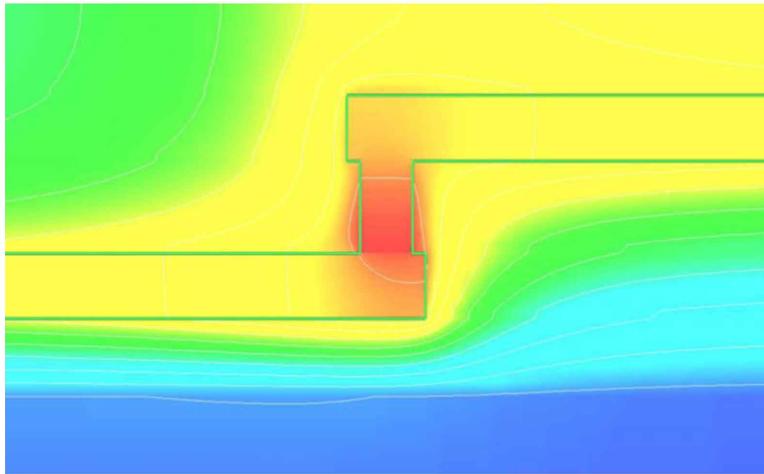


Abbildung 7.16: Temperaturverteilung am Querschnitt der Via-Struktur: Das Temperaturmaximum von 91°C befindet sich im unteren Bereich des Vias. Die Oberfläche des Substrats hat eine Temperatur von 47°C unterhalb des Vias. Der Abstand zwischen den Isothermenlinien beträgt jeweils 4.4°C .

Ausgang der aktiven Leitung 90% der Eingangsspannung anliegen. Kapazitives Übersprechen kann man am Ausgang der zweiten Leitung erkennen. Das Maximum von 0.1 V wird nach 40 ps erreicht (siehe Abb. 7.18)

Die berechneten Ausgangsspannungen stimmen dabei sehr gut mit einem fünfstufigem Schaltungsmodell überein, das aus den extrahierten Widerständen und Kapazitäten gewonnen wurde (Abb. 7.19).

In einer zweiten Simulation wurde der Einfluss des Substrates untersucht. Dazu wurde anstatt einer idealen Massefläche ein Substrat mit einer leicht dotierten Epi-Schicht mit einem spezifischen Widerstand von $10\ \Omega\text{cm}$ angenommen. Das Substrat wurde durch einen Kontakt unterhalb der linken Anschlüsse der beiden Widerstände mit Masse verbunden. Die Ausgangsspannungen wurden jetzt relativ zum Potenzial des Substrats unter den beiden rechten Enden der Widerstände berechnet. Das Ergebnis ist in Abb. 7.20 (ausgezogene Linien = FEM-Simulation) dargestellt. Das Potenzial auf der Oberfläche der Widerstände und des Substrates zu vier verschiedenen Zeitpunkten ist in Abb. 7.22 dargestellt.

Nun ist die Verzögerungszeit um einiges länger (600 ps) und das Übersprechen ist negativ mit einem Maximum von -0.31 V nach 133 ps. Die strichlierten Linien geben zum Vergleich das Er-

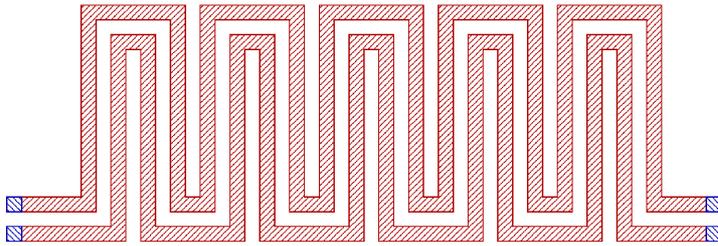


Abbildung 7.17: Polysilizium-Widerstände

gebnis einer Schaltungssimulation mit einem fünfstufigen Modell wieder. Dafür wurde in einer stationären FEM-Simulation der Substratwiderstand zwischen den beiden Substratkontakten unter dem Polysilizium-Widerstand ermittelt ($14.9\text{ k}\Omega$) und in dem fünfstufigen Schaltungsmodell mit berücksichtigt. Die Struktur der Ersatzschaltung ist in Abb. 7.21 dargestellt. In den ersten 300 ps ist eine Abweichung zwischen der Schaltungssimulation und der FEM-Simulation beobachtbar. Nach dieser Zeit verschwindet der Fehler. Anzumerken ist, dass das Ergebnis der Schaltungssimulation nicht oder nur sehr geringfügig verbessert werden kann, indem man die Anzahl der Stufen weiter erhöht. Der beobachtete Fehler lässt sich also darauf zurückführen, dass mit der Struktur des hier verwendeten Ersatzschaltbildes eine Leitung über verlustbehaftetem Substrat nicht optimal beschrieben wird. Bessere Schaltungsmodelle könnte man z.B. durch Anwendung von Ordnungsreduktionsverfahren [152–154] auf die in der FEM-Simulation berechneten Resultate gewinnen.

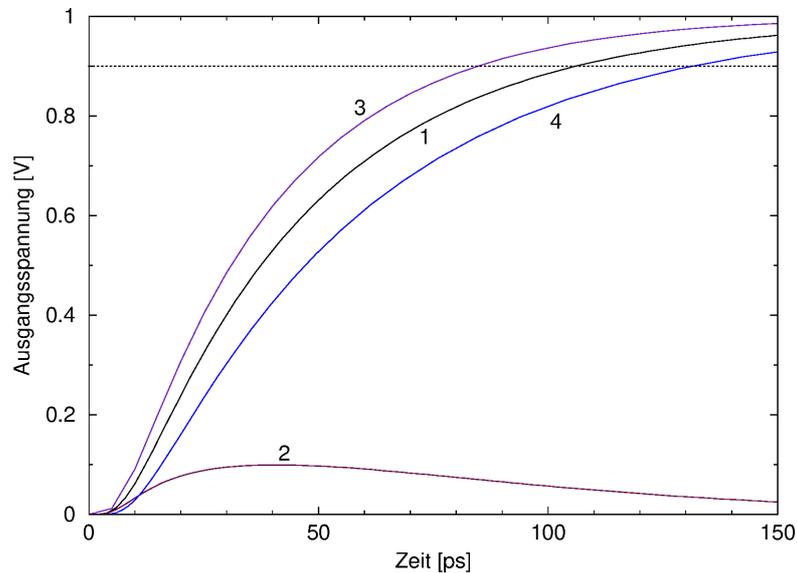


Abbildung 7.18: Ausgangsspannungen bei der Simulation des Polysilizium-Widerstand-Paares: **1** und **2**: Ein Spannungssprung wird an einem Widerstand angelegt, der zweite ist mit Masse verbunden. Kurve **1** zeigt die Ausgangsspannung am ersten Widerstand; Verzögerungszeit 106 ps. **2**: Übersprechen am zweiten Widerstand; Maximum 0.1 V. **3**: Wenn der Spannungssprung an beide Widerstände gleichzeitig angelegt wird beträgt die Verzögerungszeit nur 84 ps. **4**: Zum Vergleich ist die Ausgangsspannung einer geraden Leitung gleicher Länge angegeben; Verzögerung 132 ps.

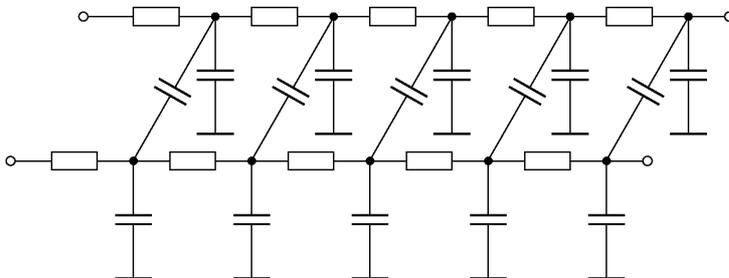


Abbildung 7.19: Ersatzschaltung für die transiente Simulation mit einem Schaltungssimulator.

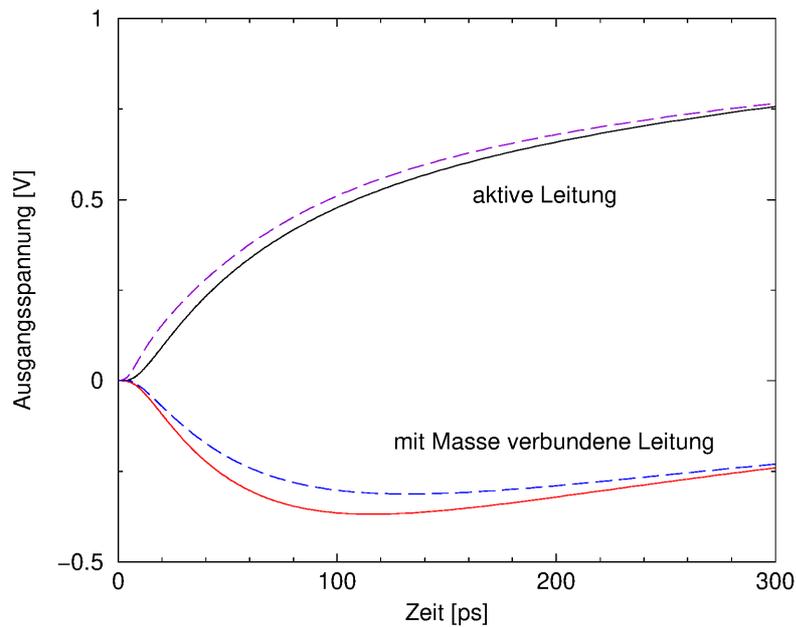


Abbildung 7.20: Ausgangsspannungen des Widerstandspaars über verlustbehaftetem Substrat

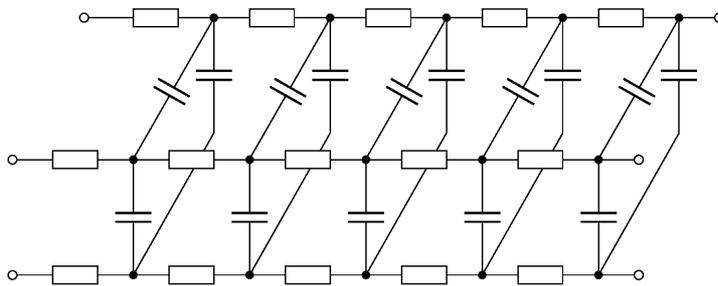


Abbildung 7.21: Ersatzschaltung zur Simulation der Polysilizium-Widerstände über verlustbehaftetem Substrat

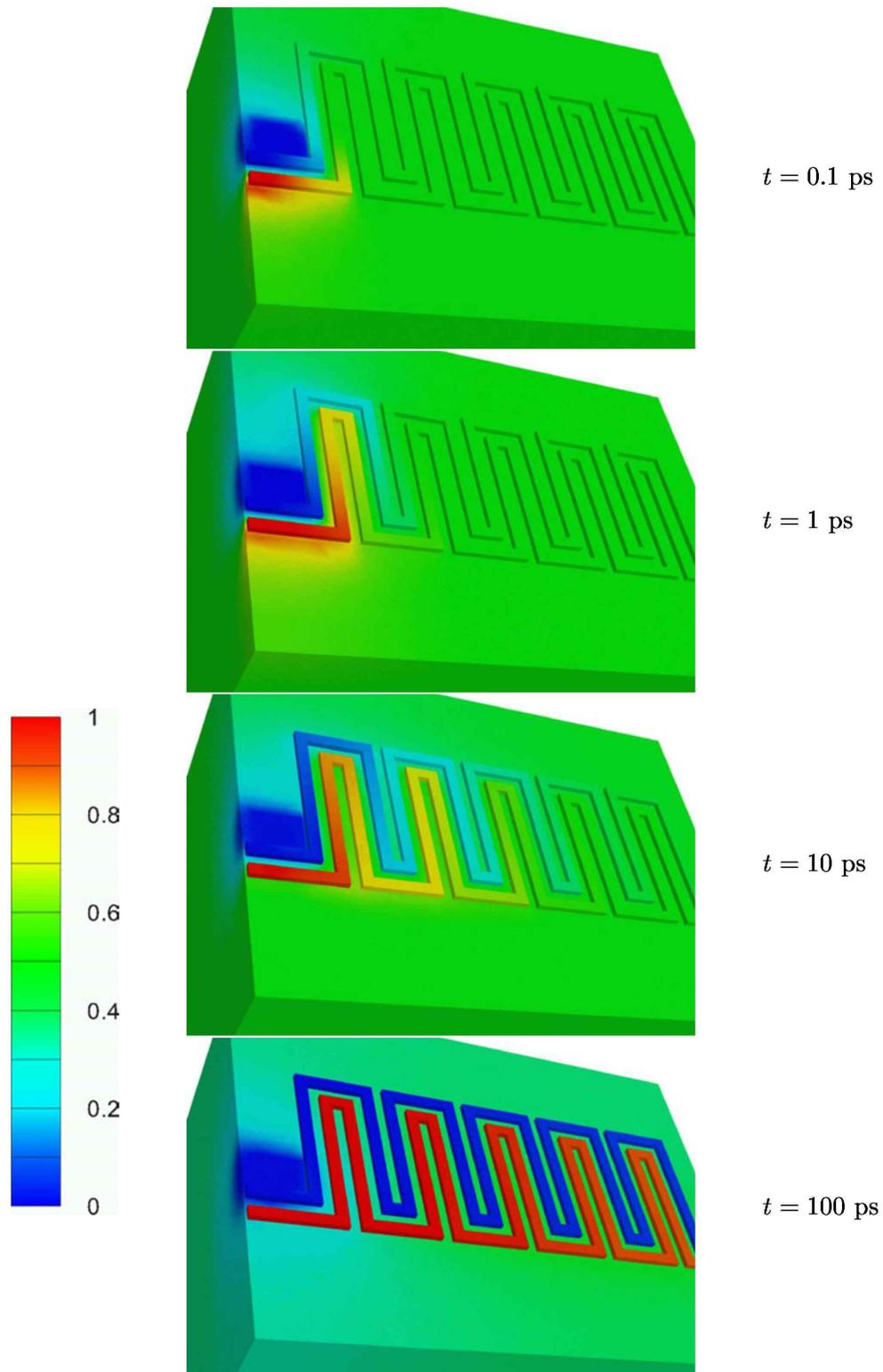


Abbildung 7.22: Potenzialverteilung (in V) auf der Oberfläche der Polysilizium-Widerstände über verlustbehaftetem Substrat

Kapitel 8

Ausblick

Die immer höher werdenden Signalfrequenzen moderner Halbleiterschaltungen erfordern die Einbeziehung der Auswirkungen des magnetischen Feldes in die Modelle zur Simulation. Besonders wenn Leitungswiderstand und Kapazitäten durch Verwendung von Materialien mit kleinerem spezifischen Widerstand und niedriger Permittivität verringert werden, gewinnt die Induktivität im Verhältnis immer mehr an Bedeutung. Verfahren zur Berechnung von Selbst- und Gegeninduktivitäten in Verbindungsstrukturen werden deshalb unbedingt notwendig. Die Implementierung und Evaluierung von verschiedenen Ansätzen zur Induktivitätsberechnung im Rahmen der hier entwickelten FEM Simulatoren ist zur Zeit im Rahmen des Dissertationsstudiums meines Kollegen Christian Harlander in Entwicklung [155]. Diese Verfahren basieren auf der stationären Stromdichteverteilung, die durch Lösung der Laplace-Gleichung mit der FEM gewonnen wird.

Da durch den Skin-Effekt der Widerstand und die Induktivität einer Leitung frequenzabhängig werden, sind für manche Anwendungen die unter stationären Voraussetzungen berechneten Werte zu ungenau. Um den Skin-Effekt zu simulieren, kann ein magnetoquasistatisches Modell verwendet werden. Dazu sollte sich die Vektorpotenzialmethode ohne allzu großen Aufwand für zeitabhängige Vorgänge erweitern lassen.

Da in integrierten Schaltungen kapazitive Kopplungen dominieren, ist in den meisten Fällen der Verschiebungsstrom nicht vernachlässigbar und eine quasistatische Berechnung erforderlich. Dies kann durch die Kombination des bereits implementierten elektro-quasistatischen Modells mit der Vektorpotenzialmethode erreicht werden.

Für Anwendungen im Bereich von Anlogschaltungen ist man oft nur an der Berechnung für eine bestimmte Frequenz oder einem schmalen Frequenzband interessiert. Diese Tatsache kann zur Reduktion des Rechenaufwands genutzt werden, indem man anstatt einer transienten Simulation eine Berechnung im Frequenzbereich durchführt. Da mit der Transformation in den Frequenzbereich keine grundlegend neuen Arten von partiellen Differentialgleichungen auftreten, sind für die Implementierung in den bestehenden FEM-Simulator keine weiteren Schwierigkeiten zu erwarten.

Bei der transienten Simulation von linearen zeitinvarianten Systemen mit konstantem Zeitschritt bleibt auch die Systemmatrix bei jedem Schritt konstant und braucht deshalb nur ein einziges Mal assembliert werden. Der rechenintensivste Teil ist jedoch das Lösen des Gleichungssystems, was trotzdem für jeden Zeitschritt ausgeführt werden muss. Ist man nicht an den elektrischen Größen im Inneren der Struktur interessiert, sondern lediglich am Klemmenverhalten, kann man Ordnungsreduktionsverfahren anwenden, die eine näherungsweise Lösung mit reduziertem Rang des Gleichungssystems erreichen. Das Ordnungsreduktionsverfahren braucht

nur ein einziges Mal angewendet werden, und jeder Zeitschritt könnte dann mit einer wesentlich kleineren Systemmatrix mit geringem Aufwand berechnet werden.

Ein wichtiger Punkt besonders in Hinblick auf automatisierte Anwendung des entwickelten FEM-Simulators ist die Weiterentwicklung der Kriterien zur Fehlerabschätzung und automatischen Gitteranpassung. Eine solche Erweiterung würde dem Anwender eine erhöhte Sicherheit über die Aussagekraft der Simulationsresultate geben, ohne dass zur Kontrolle Simulationen mit feinerem Gitter oder zusätzliche Plausibilitätsüberprüfungen gemacht werden müssen.

Um elektro-thermische Simulationen durchführen zu können, die über den im Schaltungsbetrieb üblichen Temperaturbereich hinausgehen (z.B. Simulation von ESD-Vorgängen, wo kurzzeitig Temperaturen auftreten, die über den Schmelzpunkt der Leitungen liegen), wäre es notwendig bessere Modelle für temperaturabhängige Materialparameter, die auch Phasenübergänge beinhalten, zu implementieren.

Stromdichte- und Temperaturverteilung sind neben der Mikrostruktur der Leitungen die wichtigsten Faktoren der Elektromigration. Um die Zuverlässigkeit von Verbindungsstrukturen zu beurteilen, wäre ein einfaches Elektromigrationsmodell wünschenswert, welches nach oder während einer elektro-thermischen Simulation ausgeertet wird. Da die genaue Mikrostruktur der Leitungen im Vorhinein unbekannt ist, müssen hierfür statistische Modelle verwendet werden.

Anhang A

Die „Smart Analysis Programs“

Das Programmpaket, in dem die in dieser Arbeit vorgestellten Methoden implementiert wurden, soll in diesem Abschnitt kurz vorgestellt werden. Die “Smart Analysis Programs” (SAP) bestehen aus zwei FEM Simulatoren (SCAP und STAP), den Geometriepräprozessoren (CUTGRID und LAYGRID), sowie den zwei Visualisierungsprogrammen FEMPOST und SAPVIEV. Die einzelnen Programme und der Datenfluss sind in Abb. A.1 dargestellt.

Cutgrid

Das Programm CUTGRID ist ein zweidimensionaler Geometriepräprozessor und Gittergenerator. In einer einfach strukturierten Eingabesprache kann der Anwender die geometrische Struktur des Simulationsbereiches mit Hilfe von Rechtecken, Kreisen oder allgemeinen Polygonen modellieren. Zusätzlich werden in dieser Eingabedatei die Randbedingungen als elektrische oder thermische Kontakte angegeben, sowie Materialparameter spezifiziert. Ein einfaches Beispiel für eine derartige Eingabedatei wird in Abb. A.2 gezeigt.

Der Anwender braucht bei der Eingabe der Geometriedaten nicht speziell darauf Rücksicht zu nehmen, ob sich einzelne Polygone überlappen, da in solchen Fällen verdeckte Flächen automatisch ausgeschnitten und entfernt werden. Zu diesem Zweck werden alle vorkommenden Linien miteinander verschnitten und die Flächen rekonstruiert. Anschließend werden die Polygone in einfach zusammenhängende Gebiete aufgeteilt und in Dreieckselemente zerlegt. Der Anwender hat mit einigen Optionen die Möglichkeit sowohl die Feinheit als auch die Qualität der Gitterelemente zu beeinflussen.

Das erzeugte Dreiecksgitter und die Randbedingungen werden dann in einer Textdatei abgespeichert (.fem-Datei). Dabei wird das Gitter durch eine Punktliste mit den Koordinaten der Knoten und durch eine Liste mit den Elementen dargestellt. Für jedes Gitterelement wird der Elementtyp, die Knotenindizes sowie ein Materialindex abgespeichert. Die Randbedingungen werden für jeden Kontakt in Form einer Liste mit den Randelementen dargestellt. Zusätzlich ist der Typ und der Wert (z.B. Potenzial, Stromdichte) angegeben. Den letzten Teil der .fem-Datei bildet eine Liste mit den Materialparametern (Leitfähigkeit, Dielektrizitätskonstante, usw.).

Das Gitter für das in Abb. A.2 gegebene Beispiel ist in Abb. A.3 dargestellt.

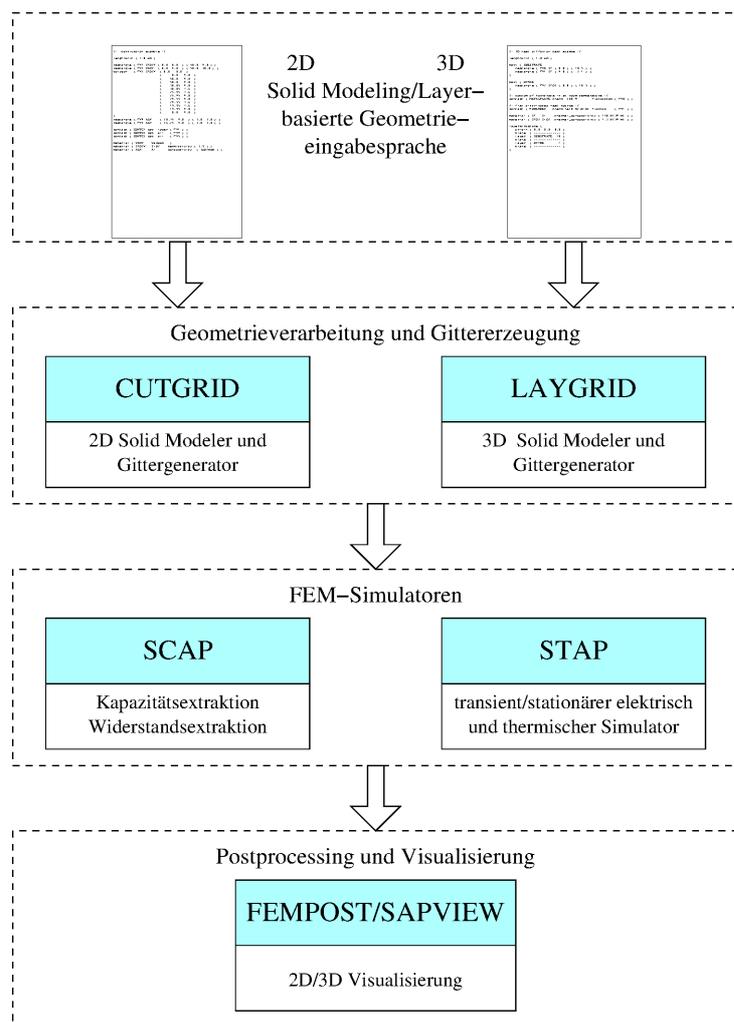


Abbildung A.1: Die Module des Simulationspakets "Smart Analysis Programs" im Überblick.

Laygrid

Laygrid ist ein Geometriepräprozessor für dreidimensionale Strukturen. Die Geometrie wird dabei schichtweise eingegeben. Die einzelnen zweidimensionalen Schichten werden in der gleichen Art und Weise wie bei CUTGRID modelliert. Zusätzlich müssen die Dicken der einzelnen Schichten angegeben werden. Diese können entweder konstant sein oder je nach Position in der x,y -Ebene einen unterschiedlichen Wert aufweisen, womit der Anwender die Möglichkeit hat, nichtplanare Geometrien zu modellieren. Die Dicke muss allerdings an jedem Ort größer Null sein.

Nachdem Laygrid die Eingabedatei gelesen hat, werden die Linien aus allen Schichten auf die (x,y) -Ebene projiziert und alle Schnitte berechnet. Danach werden die Flächen des entstandenen zweidimensionalen Netzes rekonstruiert und mit einem Gittergenerator trianguliert. Die entstandenen Dreiecke werden anschließend durch alle Schichten mittels Extrusion in Prismen verwandelt und in Tetraeder aufgespalten. Zuletzt wird für die Gitterelemente der richtige Materialindex bestimmt und für die Kontakte Randelemente erzeugt.

Als Alternative besteht die Möglichkeit mittels einer Schnittstelle zum Programm DELINK

```

lengthunit { 1.0 um }

rectangle { FX1 SI02 { 0.0 0.0 } { 1.0 1.0 } }
rectangle { FX2 AL   { 0.4 0.25 } { 0.2 0.7 } }

contact { CONTC1 cap lower { FX1 } }
contact { CONTC2 cap upper { FX1 } }

material { SI02 Si02 permittivity { 3.9 } }
material { AL   Al   conductivity { 3 u0hmcm } }

```

Abbildung A.2: Ein einfaches CUTGRID-Beispiel

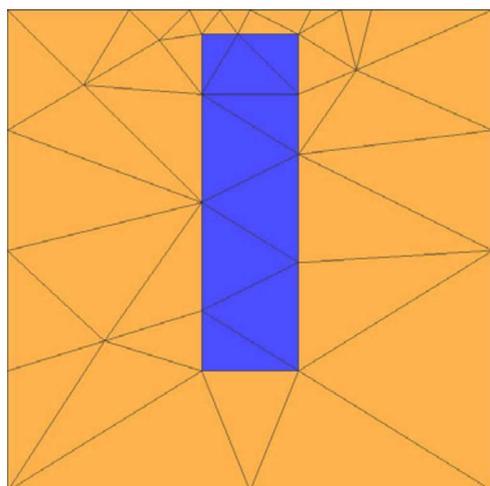


Abbildung A.3: Ein mit Cutgrid erzeugtes Dreiecksgitter

ein völlig unstrukturiertes Tetraedergitter zu erzeugen. Abschließend wird die Gitterinformation in Form einer `.fem`-Datei abgespeichert.

Scap und Stap

Die Programme SCAP und STAP sind FEM Simulatoren zur Extraktion von Kapazitäten und Widerständen, quasi-elektrostatistischen Berechnungen, sowie die stationären und transienten elektrothermischen Simulationen. Nachdem die `.fem`-Datei mit dem Simulationsgitter eingelesen wurde kann zur Erhöhung der Rechengenauigkeit optional ein oder mehrere globale Gitterverfeinerungsschritte durchgeführt werden, sowie zwischen linearen und quadratischen Ansatzfunktionen ausgewählt werden. (Dies wird über Kommandozeilenparameter realisiert, da die Simulatoren für den Batchbetrieb ausgelegt sind und keinerlei Benutzerinteraktionen während des Programmablaufs benötigen.) Anschließend werden Gitter und Randbedingungen analysiert und in Teilprobleme zerlegt (elektrisch, thermisch, usw.).

Je nach Simulationsmodus wird dann eine eigene Hauptschleife aufgerufen, in der dann die Feldberechnungen für die Parameterextraktion bzw. transienten oder stationären Simulation durchgeführt werden. Die berechneten verteilten Größen können anschließend in einer Datei abgespeichert werden.

In Abb. A.4 ist die Potenzialverteilung des Beispiels aus Abb. A.2 dargestellt.

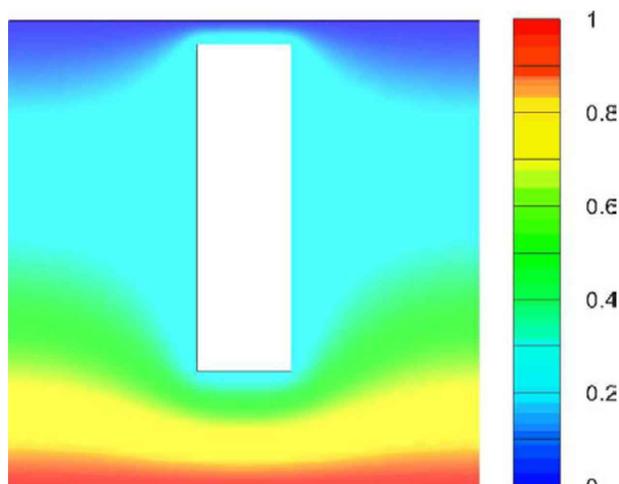


Abbildung A.4: Potenzial (in V) bei einer Kapazitätsberechnung: Das Gitter der mittleren Elektrode wurde automatisch entfernt und stattdessen eine schwebende Randbedingung angenommen.

Fempost und Sapview

Dabei handelt es sich um zwei Visualisierungsprogramme zur grafischen Darstellung der berechneten verteilten Größen. Die Programme sind mit einer grafischen Benutzerschnittstelle ausgestattet mit dem es möglich ist, die in dieser Arbeit beschriebenen Darstellungsarten interaktiv auszuwählen, zu konfigurieren und zu kombinieren. Die am Bildschirm angezeigte Grafik kann dann entweder direkt als Pixelgrafik abgespeichert werden oder in einem polygonalen Datenformat, um eine Weiterverarbeitung (z.B. Raytracing) zu ermöglichen.

Das Programmpaket SAP enthält weiters eine Reihe kleiner Hilfsprogramme für die Verarbeitung und Konvertierung der Eingabe- und Simulationsdaten, wie z.B. zum Einlesen von Layouts im CIF-Format, Parametrisierung geometrischer Strukturen, sowie zur Manipulation von Simulationsgittern.

Literaturverzeichnis

- [1] R. Bauer, *Numerische Berechnung von Kapazitäten in dreidimensionalen Verdrahtungsstrukturen*. Dissertation, Technische Universität Wien, 1994. http://www.iue.tuwien.ac.at/diss/bauer/diss_new/diss.html.
- [2] C. Jin and J. Wetzel, "Characterization and integration of porous extra low-k (XLK) dielectrics," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 99–101, 2000.
- [3] M. Bohr, "Interconnect scaling - the real limiter to high performance ULSI," in *Proc. Intl. Electron Devices Meeting*, pp. 241–244, 1995.
- [4] Z. Kohári, V. Székely, M. Rencz, V. Dudek, and B. Höfflinger, "Studies on the heat removal features of stacked SOI structures with a dedicated field solver program (SUNRED)," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [5] K. Banerjee, A. Amerasekera, N. Cheung, and C. Hu, "High-current failure model for VLSI interconnects under short-pulse stress conditions," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 18, no. 9, pp. 405–407, 1997.
- [6] M. G. Harbour and J. M. Drake, "Calculation of signal delay in integrated interconnections," *IEEE Trans. Circuits and Systems*, vol. 36, no. 2, pp. 272–276, 1989.
- [7] J. Rubinstein, P. Penfield, Jr., and M. A. Horowitz, "Signal delay in RC tree networks," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 2, no. 3, pp. 202–211, 1983.
- [8] T. Smedes, N. P. van der Meijs, and A. J. van Genderen, "Extraction of circuit models for substrate cross-talk," in *Proc. Intl. Conf. on Computer-Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 199–206, Nov. 1995.
- [9] D. K. Su, M. J. Loinaz, S. Masui, and B. A. Wooley, "Experimental results and modeling techniques for substrate noise in mixed-signal integrated circuits," *IEEE J. Solid-State Circuits*, vol. 28, no. 4, pp. 420–430, 1993.
- [10] K. Joarder, "A simple approach to modeling cross-talk in integrated circuits," *IEEE J. Solid-State Circuits*, vol. 29, no. 10, pp. 1212–1219, 1994.
- [11] P. Restle, A. Ruehli, and S. G. Walker, "Dealing with inductance in high-speed chip design," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 904–909, Juni 1999.

- [12] Z. He, M. Celik, and L. Pileggi, "SPIE: sparse partial inductance extraction," in *Proc. 34th Design Automation Conference*, (Anaheim, USA), Juni 1997.
- [13] D. C. Edelstein and J. N. Burghartz, "Spiral and solenoidal inductor structures on silicon using Cu-damascene interconnects," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 18–20, Juni 1998.
- [14] M. Kamon, M. J. Tsuk, and J. White, "Fasthenry: A multipole accelerated 3-D inductance extraction program," *IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques*, vol. 42, no. 9, pp. 1750–1758, 1994.
- [15] M. W. Beattie and L. T. Pileggi, "IC analyses including extracted inductance models," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 915–920, Juni 1999.
- [16] P. Waltz, L. Arnaud, G. Tartavel, and G. Lormand, "Influence of thermal heating effect on pulsed DC electromigration result analysis," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [17] J. R. Black, "Electromigration—A brief study and some recent results," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 16, no. 4, pp. 338–347, 1969.
- [18] J. Coughlan, S. Foley, and A. Mathewson, "Finite element analysis of stress distributions in interconnect structures," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [19] D. S. Gardner, J. D. Meindl, and K. C. Saraswat, "Interconnection and electromigration scaling theory," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-34, no. 3, pp. 633–643, 1987.
- [20] R. J. Gleixner and W. D. Nix, "A physically based model of electromigration and stress-induced void formation in microelectronic interconnects," *J. Appl. Phys.*, vol. 86, no. 4, pp. 1932–1944, 1999.
- [21] A. Witvrouw, P. Roussel, G. Beyer, J. Proost, and K. Maex, "Incubation, time-dependent drift and saturation during Al-Si-Cu electromigration: Modelling and implications for design," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 27–29, Juni 1998.
- [22] G. Benstetter and A. von Glasow, "IC-Ausfälle durch Elektromigration," *Mikroelektronik F&M*, vol. 107, no. 11, pp. 13–17, 1999.
- [23] M. Lerme, "Multi layer metallization," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), pp. 314–320, 1997.
- [24] C. S. Chang, K. A. Monning, and M. Melliar-Smith, "Interconnection challenges and the national technology roadmap for semiconductors," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 3–6, Juni 1998.
- [25] A. K. Stamper, M. B. Fuselier, and X. Tian, "Advanced wiring RC delay issues for sub-0.25-micron generation CMOS," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 62–64, Juni 1998.

- [26] J. Zhang, D. Denning, G. Braeckelmann, R. Venkatraman, R. Fiordalice, and E. Weitzmann, "CVD Cu process integration for sub-0.25 μm technologies," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 163–165, Juni 1998.
- [27] C. Cregut, G. Le Carval, and J. Chilo, "Low-k dielectrics influence on crosstalk: Electromagnetic analysis and characterization," in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 59–61, Juni 1998.
- [28] S. C. Sun, "Process technologies for advanced metallization and interconnect systems," in *Proc. Intl. Electron Devices Meeting*, pp. 765–767, 1997.
- [29] P. Ghosh, R. Mangaser, C. Mark, and K. Rose, "Interconnect-dominated VLSI design," in *Proc. 20th Anniversary Conference on Advanced Research in VLSI*, pp. 114–122, 1999.
- [30] R. G. Pomerleau, P. D. Frazon, and G. L. Bilbro, "Improved delay prediction for on-chip buses," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 497–451, Juni 1999.
- [31] J.-S. Yim and C.-M. Kyung, "Reducing cross-coupling among interconnect wires in deep-submicron datapath designs," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 485–490, Juni 1999.
- [32] J. Cong, L. He, C.-K. Koh, and Z. Pan, "Global interconnect sizing and spacing with consideration of coupling capacitance," in *Proc. Intl. Conf. Computer Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 478–485, Nov. 1997.
- [33] S. S. Sapatnekar, "Wire sizing as a convex optimization problem: Exploring the area-delay tradeoff," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 15, no. 1, pp. 1001–1011, 1996.
- [34] K. Rahmat, O. S. Nakagawa, S.-Y. Oh, and J. Moll, "A scaling scheme for interconnect in deep-submicron processes," in *Proc. Intl. Electron Devices Meeting*, pp. 245–248, 1995.
- [35] K. D. Boese, J. Cong, K. S. Leung, A. B. Kahng, and D. Zhou, "On high-speed VLSI interconnects: Analysis and design," in *Proc. IEEE Asia-Pacific Conf. on Circuits and Systems*, pp. 35–40, Dez. 1992.
- [36] C.-P. Chen and N. Menezes, "Noise-aware repeater insertion and wire sizing for on-chip interconnect using hierarchical moment matching," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 502–506, Juni 1999.
- [37] R. W. Dutton, "The role of TCAD in parasitic analysis of IC's," in *23rd European Solid State Device Research Conference - ESSDERC'93* (J. Borel, P. Gentil, J. Noblanc, A. Nouailhat, and M. Verdone, eds.), (Gif-sur-Yvette Cedex, Frankreich), pp. 75–81, 1993.
- [38] E. Chiprout, "Hierarchical interconnect modeling," in *Proc. Intl. Electron Devices Meeting*, pp. 125–128, 1997.
- [39] L. J. Borucki, "Living in an expanding TCAD space," in *Proc. 2nd Intl. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems*, (San Juan, USA), pp. 4–7, Apr. 1999.

- [40] N. P. van der Meijs and T. Smedes, "Accurate interconnect modeling: Towards multi-million transistor chips as microwave circuits," in *Proc. Intl. Conf. Computer Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 244–251, Nov. 1996.
- [41] M. Kamon, S. McCormick, and K. Shepard, "Interconnect parasitic extraction in the digital IC design methodology," in *Proc. Intl. Conf. on Computer-Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 223–230, Nov. 1999.
- [42] A. Ringhandt and H. Wagemann, "An exact calculation of the two-dimensional capacitance of a wire and a new approximation formula," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 40, no. 5, pp. 1028–1032, 1993.
- [43] A. Ruehli and P. Brennan, "Capacitance models for integrated circuit metallization wires," *IEEE J. Solid-State Circuits*, vol. SC-10, no. 6, pp. 530–536, 1975.
- [44] R. Dang and N. Shigyo, "Coupling capacitances for two-dimensional wires," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. EDL-2, no. 8, pp. 196–197, 1981.
- [45] C. Yuan and T. Trick, "A simple formula for the estimation of the capacitance of two-dimensional interconnects in VLSI circuits," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. EDL-3, no. 12, pp. 391–393, 1982.
- [46] T. Sakurai and K. Tamaru, "Simple formulas for two- and three-dimensional capacitances," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-30, no. 2, pp. 183–185, 1983.
- [47] K.-J. Chang, S.-Y. Oh, and K. Lee, "HIVE: An express and accurate interconnect capacitance extractor for submicron multilevel conductor systems," in *VLSI Multilevel Interconnection Conf.*, (Santa Clara, USA), pp. 359–363, 1991.
- [48] J.-H. Chern, J. Huang, L. Arledge, P.-C. Li, and P. Yang, "Multilevel metal capacitance models for CAD design synthesis systems," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 13, no. 1, pp. 32–34, 1992.
- [49] P. Wright and Y. Shih, "Capacitance of top leads metal—comparison between formula, simulation, and experiment," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 12, no. 12, pp. 1897–1902, 1993.
- [50] U. Choudhury and A. Sangiovanni-Vincentelli, "Automatic generation of analytical models for interconnect capacitances," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 14, no. 4, pp. 470–480, 1995.
- [51] N. Arora, K. Raol, R. Schumann, and L. Richardson, "Modeling and extraction of interconnect capacitances for multilayer VLSI circuits," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 15, no. 1, pp. 58–67, 1996.
- [52] J. Cong, L. He, A. B. Kahng, D. Noice, and S. H.-C. Yen, "Analysis and justification of a simple, practical 2 1/2-D capacitance extraction methodology," in *Proc. 34rd Design Automation Conference*, (Anaheim, USA), pp. 627–632, Juni 1997.
- [53] S.-C. Wong, P. S. Liu, J.-W. Ru, and S.-T. Lin, "Interconnect capacitance models for VLSI circuits," *Solid-State Electronics*, vol. 42, no. 6, pp. 696–977, 1998.

- [54] S.-C. Wong, G.-Y. Lee, and D.-J. Ma, "Modeling of interconnect capacitance, delay, and crosstalk in VLSI," *IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing*, vol. 13, no. 1, pp. 108–111, 2000.
- [55] M. Horowitz and R. W. Dutton, "Resistance extraction from mask layout data," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. CAD-2, no. 3, pp. 145–150, 1983.
- [56] T. A. Johnson, R. W. Knepper, V. Marcello, and W. Wang, "Chip substrate resistance modeling technique for integrated circuit design," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 3, no. 2, pp. 126–134, 1984.
- [57] A. J. van Genderen, N. P. van der Meijs, and T. Smedes, "Fast computation of substrate resistances in large circuits," in *Proc. European Design and Test Conf.*, (Paris, Frankreich), pp. 560–565, März 1996.
- [58] T. Li, C.-H. Tsai, E. Rosenbaum, and S.-M. Kang, "Substrate modeling and lumped substrate resistance extraction for CMOS ESD/latchup circuit simulation," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 549–554, Juni 1999.
- [59] A. Deutsch, G. V. Kopcsay, V. A. Ranieri, J. K. Cataldo, E. A. Galligan, W. S. Graham, R. P. McGouey, S. L. Nunes, J. R. Paraszczak, J. J. Ritsko, R. J. Serino, C. Y. Shih, and J. S. Wilczynski, "High-speed signal propagation on lossy transmission lines," *IBM J. Res. Dev.*, vol. 34, no. 4, 1990.
- [60] A. Deutsch, G. V. Kopcsay, C. W. Surovic, B. J. Rubin, L. M. Terman, R. P. Dunne, Jr., T. A. Gallo, and R. H. Dennard, "Modeling and characterization of long on-chip interconnections for high performance microprocessors," *IBM J. Res. Dev.*, vol. 39, no. 5, pp. 547–567, 1995.
- [61] F. Charlet, C. Bermond, S. Putot, G. LeCarval, and B. Flechet, "Extraction of (r, l, c, g) interconnect parameters in 2D transmission lines using fast and efficient numerical tools," in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Seattle, USA), pp. 87–89, Sept. 2000.
- [62] A. B. Kahng and S. Muddu, "Delay analysis of VLSI interconnections using the diffusion equation model," in *Proc. 31st Design Automation Conference*, pp. 563–569, Juni 1994.
- [63] A. B. Kahng, K. Masuko, and S. Muddu, "Analytical delay models for VLSI interconnects under ramp input," in *Proc. Intl. Conf. Computer Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 802–808, Nov. 1996.
- [64] A. B. Kahng and S. Muddu, "Accurate analytical delay models for VLSI interconnects," in *Proc. Intl. Symposium on Circuits and Systems*, (Atlanta, USA), pp. 548–552, Mai 1996.
- [65] S.-Y. Kim, N. Gopal, and L. T. Pillage, "Time-domain macromodels vor VLSI interconnect analysis," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 13, no. 10, pp. 1257–1270, 1994.
- [66] E. Tuncer and D. P. Neikirk, "Highly accurate quasi-static modeling of microstrip lines over lossy substrates," *IEEE Microwave and Guided Wave Lett.*, vol. 2, no. 10, pp. 409–411, 1992.

- [67] K. Banerjee, A. Mehrotra, A. Sangiovanni-Vincentelli, and C. Hu, "On thermal effects in deep sub-micron VLSI interconnects," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 885–891, Juni 1999.
- [68] C. T. Chuang and R. Puri, "SOI digital CMOS VLSI - a design perspective," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 709–714, Juni 1999.
- [69] X. Gui, S. Dew, and M. Brett, "Thermal simulation of thin-film interconnect failure caused by high current pulses," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 42, no. 7, pp. 1386–1388, 1995.
- [70] G. Digele, S. Lindenkreuz, and E. Kasper, "Electro-thermal interaction on circuit level under the influence of packaging," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [71] P. Waltz, G. Lormand, and L. Arnaud, "Thermal analytical model for analysis of pulsed DC electromigration results," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [72] B. Krabbenborg, A. Bosma, H. de Graaff, and A. Mouthaan, "Layout to circuit extraction for three-dimensional thermal-electrical circuit simulation of device structures," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 15, no. 7, pp. 765–774, 1996.
- [73] A. Cezairliyan, *Specific heat of solids*. Hemisphere Publishing Corp., 1988.
- [74] A. Seidl, H. Klose, M. Svoboda, J. Oberndorfer, and W. Rösner, "CAPCAL—a 3-D capacitance solver for support of CAD systems," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 7, no. 5, pp. 549–556, 1988.
- [75] A. Zemanian, R. Tewarson, C. Ju, and J. Jen, "Three-dimensional capacitance computations for VLSI/ULSI interconnections," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 8, no. 12, pp. 1319–1326, 1989.
- [76] C. C. Taylor, G. N. Elkhouri, and T. E. Wade, "On the parasitic capacitances of multilevel parallel metallization lines," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-32, no. 11, pp. 2408–2414, 1985.
- [77] R. H. Uebbing and M. Fukuma, "Process-based three-dimensional capacitance simulation—TRICEPS," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 5, no. 1, pp. 215–220, 1986.
- [78] R. Mittra, W. D. Becker, and P. H. Harms, "A general purpose Maxwell solver for the extraction of equivalent circuits of electronic package components for circuit simulation," *IEEE Trans. Circuits and Systems-I: Fundamental Theory and Applications*, vol. 39, no. 11, pp. 964–973, 1992.
- [79] H. Schwarz, *Numerische Mathematik*. Teubner, 1993. 3. Auflage.
- [80] N. P. van der Meijs and A. J. van Genderen, "Delayed frontal solution for finite-element based resistance extraction," in *Proc. 32nd Design Automation Conference*, (San Francisco, USA), pp. 273–278, Juni 1995.

- [81] A. J. van Genderen and N. P. van der Meijs, "Using articulation nodes to improve the efficiency of finite-element based resistance extraction," in *Proc. 33rd Design Automation Conference*, (Las Vegas, USA), pp. 758–763, Juni 1996.
- [82] R. Bauer and S. Selberherr, "Preconditioned CG-solvers and finite element grids," in *Proc. CCIM*, vol. 2, (Breckenridge, USA), Apr. 1994.
- [83] P. E. Cottrell and E. M. Buturla, "VLSI wiring capacitance," *IBM J. Res. Dev.*, vol. 29, no. 3, pp. 277–288, 1985.
- [84] O. E. Akcasu, J. Lu, A. Dalal, S. Mitra, L. Lev, N. Vasseghi, A. Pance, H. Hingarh, and H. Basit, "'NET-AN' a full three-dimensional parasitic interconnect distributed RLC extractor for large full chip applications," in *Proc. Intl. Electron Devices Meeting*, pp. 495–498, 1995.
- [85] A. E. Ruehli and P. A. Brennan, "Efficient capacitance calculation for three-dimensional multiconductor systems," *IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques*, vol. 21, no. 2, p. 76, 1973.
- [86] Z.-Q. Ning, P. M. Dewilde, and F. L. Neerhoff, "Capacitance coefficients for VLSI multi-level metallization lines," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-34, no. 3, pp. 644–649, 1987.
- [87] J. Chan, A. Vladimirescu, X.-C. Gao, P. Liebmann, and J. Valainis, "Nonlinear transformer model for circuit simulation," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 10, no. 4, pp. 476–482, 1991.
- [88] J. Tausch and J. White, "Multipole accelerated capacitance calculation for structures with multiple dielectrics with high permittivity ratios," in *Proc. 33rd Design Automation Conference*, (Las Vegas, USA), Juni 1996.
- [89] P. J. H. Elias and G. P. J. F. M. Maas, "Matrix reduction in IC and PCB parasitics extraction programs," in *Proc. ProRISC IEEE Benelux Workshop on Circuits, Systems and Signal Processing*, (Mierlo, Niederlande), pp. 143–148, Nov. 1996.
- [90] U. Geigenmuller and N. P. van der Meijs, "Cartesian multipole based numerical integration for 3D capacitance extraction," in *Proc. European Design and Test Conf.*, (Paris, Frankreich), pp. 256–259, März 1997.
- [91] M. Bächtold, J. G. Korvink, and H. Baltes, "Enhanced multipole acceleration technique for the solution of large Poisson computations," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 15, no. 12, pp. 1541–1546, 1996.
- [92] S. Kapur and J. Zhao, "A fast method of moments solver for efficient parameter extraction of MCMs," in *Proc. 34rd Design Automation Conference*, (Anaheim, USA), pp. 347–450, Juni 1997.
- [93] S. Kapur and D. E. Long, "IES³: A fast integral equation solver for efficient 3-dimensional extraction," in *Proc. Intl. Conf. Computer Aided Design*, (San Jose, USA), pp. 448–455, Nov. 1997.

- [94] J. Tausch and J. White, "A multiscale method for fast capacitance extraction," in *Proc. 36th Design Automation Conference*, (New Orleans, USA), pp. 537–542, Juni 1999.
- [95] J. Phillips and J. White, "A precorrected-FFT method for electrostatic analysis of complicated 3-D structures," *IEEE Trans. Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 16, no. 10, pp. 1059–1072, 1997.
- [96] H.-M. Hou, C.-S. Sheen, and C.-Y. Wu, "A novel modeling technique for efficiently computing 3-D capacitances of VLSI multilevel interconnections—BFEM," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 45, no. 1, pp. 200–205, 1998.
- [97] J. Zhao, "Singularity-treated quadrature-evaluated method of moments solver for 3-D capacitance extraction," in *Proc. 37th Design Automation Conference*, (Los Angeles, USA), pp. 536–539, Juni 2000.
- [98] K. Nabors and J. White, "Fastcap: A multipole accelerated 3-D capacitance extraction program," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 10, no. 11, pp. 1447–1459, 1991.
- [99] A. J. van Genderen and N. P. van der Meijs, "SPACE: a finite element based capacitance extraction program for submicron integrated circuits," *Software Tools for Process, Device and Circuit Modelling*, no. 7, pp. 45–55, 1989.
- [100] F. Beeftink, A. J. van Genderen, N. P. van der Meijs, and J. Poltz, "Deep submicron ULSI parasitics extraction using SPACE," in *Design, Automation and Test in Europe Conference, Designer Track*, pp. 81–86, Feb. 1998.
- [101] F. Beeftink, A. J. van Genderen, and N. P. van der Meijs, "SPACE features and performance summary," Tech. Rep. TR 97-02, Delft University of Technology, Dept of EE, Delft, Niederlande, Sept. 1997.
- [102] M. W. Beattie and L. T. Pileggi, "Bounds for BEM capacitance extraction," in *Proc. 34th Design Automation Conference*, (Anaheim, USA), pp. 133–136, Juni 1997.
- [103] T. Smedes, "A boundary element method for substrate cross-talk analysis," in *Proc. ProRISC/IEEE Benelux Workshop on Circuits, Systems and Signal Processing*, (Mierlo, Niederlande), pp. 285–294, März 1995.
- [104] A. van Genderen and N. van der Meijs, "Modeling substrate coupling effects using a layout-to-circuit extraction program," in *Proc. ProRISC IEEE 8th Annual Workshop on Circuits, Systems and Signal Processing*, (Mierlo, Niederlande), pp. 193–200, Nov. 1997.
- [105] E. B. Nowacka and N. P. van der Meijs, "The hybrid element method for capacitance extraction in a VLSI layout verification system," in *Proc. Software for Electrical Engineering Analysis and Design* (P. P. Silvester, ed.), (Pisa, Italien), pp. 125–134, Mai 1996.
- [106] W. Sun, W. W.-M. Dai, and W. Hong, "Fast parameters extraction of general three-dimension interconnects using geometry independent measured equation of invariance," in *Proc. 33rd Design Automation Conference*, (Las Vegas, USA), Juni 1996.
- [107] Y. Le Coz and R. Iverson, "A stochastic algorithm for high speed capacitance extraction in integrated circuits," *Solid-State Electron.*, vol. 35, no. 7, pp. 1005–1012, 1992.

- [108] Y. Le Coz and R. Iverson, "A high-speed capacitance extraction algorithm for multi-level VLSI interconnects," in *VLSI Multilevel Interconnection Conf.*, (Santa Clara, USA), pp. 364–366, 1991.
- [109] J. N. Jere and Y. L. L. Coz, "An improved floating-random-walk algorithm for solving the multi-dielectric dirichlet problem," *IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques*, vol. 41, no. 2, pp. 325–329, 1993.
- [110] Y. L. L. Coz, H. J. Grueb, and R. B. Iverson, "Performance of random-walk capacitance extractors for IC interconnects: A numerical study," *Solid-State Electron.*, vol. 42, no. 4, pp. 581–588, 1998.
- [111] A. Hieke, "Simple ADPL implementation of a 3D FEM simulator for mutual capacitances of arbitrary shaped objects like interconnects," in *Proc. 2nd Intl. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems*, (San Juan, USA), pp. 172–175, Apr. 1999.
- [112] D. Cartwright, G. Csanak, D. George, R. Walker, A. Kuprat, A. Dengi, and W. Grobmann, "Capacitance extraction from complex 3D interconnect structures," in *Proc. 2nd Intl. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems*, (San Juan, USA), pp. 159–162, Apr. 1999.
- [113] J. Trattles, A. O'Neill, and B. Mecrow, "Three-dimensional finite-element investigation of current crowding and peak temperatures in VLSI multilevel interconnections," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 40, no. 7, pp. 1344–1347, 1993.
- [114] S. Rzepka, K. Banerjee, E. Meusel, and C. Hu, "Characterization of self-heating in advanced VLSI interconnect lines based on thermal finite element simulation," *IEEE Trans. on Components, Packaging and Manufacturing Technology-Part A*, vol. 21, no. 3, pp. 406–411, 1998.
- [115] D. Chen, E. Li, E. Rosenbaum, and S.-M. Kang, "Interconnect thermal modeling for accurate simulation of circuit timing and reliability," *IEEE Trans. Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 19, no. 2, pp. 197–205, 2000.
- [116] J. C. Nedelec, "A new family of mixed finite elements in \mathbb{R}^3 ," *Numer. Math.*, vol. 50, pp. 57–58, 1986.
- [117] W.-H. Liu and A. Sherman, "Comparative analysis of the Cuthill-McKee and the reverse Cuthill-McKee ordering algorithms for sparse matrices," *SIAM J. Numer. Anal.*, vol. 13, no. 2, pp. 198–213, 1976.
- [118] J. R. Shewchuk, "An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain," Tech. Rep. CMU-CS-94-125, School of Computer Science, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA 15213, Aug. 1994.
- [119] T. Manteuffel, "The shifted incomplete Cholesky factorization," in *Sparse Matrix Proceedings* (I. Duff and G. Stewart, eds.), pp. 41–61, 1979.
- [120] H. van der Vorst, "High performance preconditioning," *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, vol. 10, no. 6, pp. 1174–1185, 1989.

- [121] F. F. Campos and N. R. C. Birkett, "An efficient solver for multi-right-hand-side linear systems based on the CCCG(η) method with applications to implicit time-dependent partial differential equations," *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 19, no. 1, pp. 126–138, 1998.
- [122] V. Simoncini and E. Gallopoulos, "An iterative method for nonsymmetric systems with multiple right-hand sides," *SIAM J. Sci. Comput.*, vol. 16, no. 4, pp. 917–933, 1995.
- [123] M. Mäntylä, *An Introduction to Solid Modeling*. Rockville: Computer Science Press, 1988.
- [124] F. Preparata and M. Shamos, *Computational Geometry*. New York: Springer, 1985.
- [125] J. O'Rourke, *Computational Geometry in C*. Cambridge University Press, 1995.
- [126] Y.-J. Chiang and R. Tamassia, "Dynamic algorithms in computational geometry," *Proc. IEEE*, vol. 80, no. 9, pp. 1412–1434, 1992.
- [127] D. Ayala, P. Brunet, R. Juan, and I. Navazo, "Object representation by means of non-minimal division quadtrees and octrees," *ACM Trans. Graphics*, vol. 4, no. 1, pp. 41–59, 1985.
- [128] M. Shephard and M. Georges, "Automatic three-dimensional mesh generation by the finite octree technique," *Intl. J. Numer. Meth. Eng.*, vol. 32, pp. 709–749, 1991.
- [129] M. Yerry and M. Shephard, "Automatic three-dimensional mesh generation by the modified-octree technique," *Intl. J. Numer. Meth. Eng.*, vol. 20, pp. 1965–1990, 1984.
- [130] A. Paoluzzi, F. Bernardini, C. Cattani, and V. Ferrucci, "Dimension-independent modeling with simplicial complexes," *ACM Trans. Graphics*, vol. 12, no. 1, pp. 56–102, 1993.
- [131] Z. Yu, K. Wang, T. Chen, R. W. Dutton, and J. T. Watt, "Layout-based 3D solid modeling for IC," in *Proc. Intl. Symp. on VLSI Technology, Systems, and Applications*, (Taipei, Taiwan), Juni 1995.
- [132] E. Bär, J. Lorenz, and H. Ryssel, "Three-dimensional simulation of contact hole metalization using aluminum sputter deposition at elevated temperatures," in *27th European Solid-State Device Research Conference* (H. Grünbacher, ed.), (Stuttgart, Deutschland), 1997.
- [133] H. Kirchauer and S. Selberherr, "Three-dimensional photolithography simulation," *IEEE Journal of Technology Computer Aided Design*, no. 6, 1998. <http://www.ieee.org/journal/tcad/>.
- [134] E. Bär and J. Lorenz, "3-D simulation of LPCVD using segment-based topography discretization," *IEEE Trans. Semiconductor Manufacturing*, vol. 9, no. 1, pp. 67–73, 1996.
- [135] E. Strasser and S. Selberherr, "Algorithms and models for cellular based topography simulation," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 14, no. 9, pp. 1104–1114, 1995.
- [136] P. Fleischmann, R. Sabelka, A. Stach, R. Strasser, and S. Selberherr, "Grid generation for three-dimensional process and device simulation," in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Tokyo, Japan), pp. 161–166, 1996.

- [137] P. Fleischmann, W. Pyka, and S. Selberherr, "Mesh generation for application in technology CAD," *IEICE Trans. Electron.*, vol. E82-C, no. 6, pp. 937–947, 1999.
- [138] J. R. Shewchuk, "Tetrahedral mesh generation by Delaunay refinement," in *Proc. Fourteenth Annual Symposium on Computational Geometry*, Juni 1998.
- [139] J. R. Shewchuk, "Triangle: Engineering a 2D quality mesh generator and Delaunay triangulator," in *First Workshop on Applied Computational Geometry*, pp. 124–133, Mai 1996.
- [140] R. Bank, *PLTMG: A Software Package for Solving Elliptic Partial Differential Equations*, vol. 15 of *Frontiers in Applied Mathematics*. Philadelphia: SIAM, 1994. Users' Guide 7.0.
- [141] P. Fleischmann and S. Selberherr, "Three-dimensional Delaunay mesh generation using a modified advancing front approach," in *Proc. 6th Intl. Meshing Roundtable*, (Park City, USA), pp. 267–278, Okt. 1997.
- [142] Silicon Graphics, "OpenGL www center." <http://www.sgi.com/Technology/openGL>, 1997.
- [143] B. Paul, "The mesa 3D graphics library home page." <http://www.mesa3d.org/>, 1999.
- [144] L. Gritz and J. K. Hahn, "BMRT: A global illumination implementation of the RenderMan standard," *Journal of Graphics Tools*, vol. 1, no. 3, pp. 29–47, 1996.
- [145] W. Schroeder, K. Martin, and B. Lorensen, *The Visualization Toolkit, An Object-Oriented Approach to 3D Graphics*. Prentice Hall PTR/New Jersey, 1996.
- [146] W. Schroeder, K. Martin, and B. Lorensen, "The visualization toolkit (vtk) home page." <http://www.kitware.com/vtk.html>, 1997.
- [147] W. J. Schroeder, K. M. Martin, and W. E. Lorensen, "The design and implementation of an object-oriented toolkit for 3D graphics and visualization," in *Proc. Visualization '96*, (Burlingame, USA), Okt. 1996.
- [148] S.-K. Ueng, C. Sikorski, and K.-L. Ma, "Efficient streamline, streamribbon, and streamtube constructions on unstructured grids," *IEEE Trans. Visualization and Computer Graphics*, vol. 2, no. 2, pp. 100–110, 1996.
- [149] R. Sabelka, K. Koyama, and S. Selberherr, "STAP—A finite element simulator for three-dimensional thermal analysis of interconnect structures," in *Simulation in Industry—9th European Simulation Symposium*, (Passau, Deutschland), pp. 621–625, Okt. 1997.
- [150] J. Trattles, A. O'Neill, and B. Mecrow, "Three dimensional finite element determination of current density and temperature distributions in pillar vias," in *VLSI Multilevel Interconnection Conf.*, (Santa Clara, USA), pp. 343–345, 1991.
- [151] A. Stach, "Simulation von MOSFET-Schaltungen," Diplomarbeit, Technische Universität Wien, 1995.
- [152] L. T. Pillage and R. A. Rohrer, "Asymptotic waveform evaluation for timing analysis," *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 9, no. 4, pp. 352–366, 1990.

- [153] P. J. H. Elias and N. P. van der Meijs, “Extracting circuit models for large RC interconnections that are accurate up to a predefined signal frequency,” in *Proc. 33rd Design Automation Conference*, (Las Vegas, USA), pp. 764–769, Juni 1996.
- [154] A. Odabasioglu, M. Celik, and L. T. Pileggi, “PRIMA: Passive reduced-order interconnect macromodeling algorithm,” *IEEE Trans. Computer-Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, vol. 17, no. 8, pp. 645–654, 1998.
- [155] C. Harlander, R. Sabelka, and S. Selberherr, “Inductance calculation in interconnect structures,” in *Proc. 3rd Intl. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems*, (San Diego, USA), pp. 416–419, März 2000.

Eigene Veröffentlichungen

- [V1] P. Fleischmann, R. Sabelka, A. Stach, R. Strasser, and S. Selberherr, “Grid generation for three dimensional process and device simulation,” in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, (Tokyo, Japan), pp. 161–166, Business Center for Academic Societies Japan, 1996, (eingeladen).
- [V2] A. Stach, R. Sabelka, and S. Selberherr, “Three-dimensional layout-based thermal and capacitive simulation of interconnect structures,” in *Proc. 16th IASTED Int. Conf. on Modelling, Identification and Control*, (Innsbruck), pp. 16–19, 1997.
- [V3] R. Sabelka, K. Koyama, and S. Selberherr, “STAP—A finite element simulator for three-dimensional thermal analysis of interconnect structures,” in *Simulation in Industry—9th European Simulation Symposium*, (Passau, Deutschland), pp. 621–625, Okt. 1997.
- [V4] R. Sabelka and S. Selberherr, “SAP—A program package for three-dimensional interconnect simulation,” in *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, (Burlingame, USA), pp. 250–252, June 1998.
- [V5] R. Martins, W. Pyka, R. Sabelka, and S. Selberherr, “High-precision interconnect analysis,” *IEEE Trans. Computer-Aided Design*, vol. 17, no. 11, pp. 1148–1159, 1998.
- [V6] R. Martins, W. Pyka, R. Sabelka, and S. Selberherr, “Modeling integrated circuit interconnections,” in *Proc. Int. Conf. on Microelectronics and Packaging*, (Curitiba, Brasilien), pp. 144–151, Aug. 1998.
- [V7] R. Martins, R. Sabelka, W. Pyka, and S. Selberherr, “Rigorous capacitance simulation of DRAM cells,” in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices* (K. D. Meyer and S. Biesemans, eds.), pp. 69–72, (Leuven, Belgien), Sept. 1998.
- [V8] R. Sabelka, R. Martins, and S. Selberherr, “Accurate layout-based interconnect analysis,” in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices* (K. De Meyer and S. Biesemans, eds.), pp. 336–339, (Leuven, Belgien), Sept. 1998.
- [V9] C. Harlander, R. Sabelka, R. Minixhofer, and S. Selberherr, “Three-dimensional transient electro-thermal simulation,” in *5th THERMINIC Workshop*, (Rome, Italy), pp. 169–172, Okt. 1999.
- [V10] C. Harlander, R. Sabelka, and S. Selberherr, “Inductance calculation in interconnect structures,” in *Proc. 3rd Int. Conf. on Modeling and Simulation of Microsystems*, pp. 416–419, (San Diego, USA), März 2000.

- [V11] R. Sabelka, Ch. Harlander, and S. Selberherr, "Propagation of RF signals in microelectronic structures," in *Abstracts Challenges in Predictive Process Simulation*, pp. 50–51, (Wandlitz, Deutschland), Mai 2000, (eingeladen).
- [V12] R. Sabelka, Ch. Harlander, and S. Selberherr, "The state of the art in interconnect simulation," in *Simulation of Semiconductor Processes and Devices*, pp. 6–11, (Seattle, USA), Sep. 2000, (eingeladen).
- [V13] R. Sabelka, and S. Selberherr, "A finite element simulator for three-dimensional analysis of interconnect structures," *Microelectronics Journal*, vol. 32, no. 2, pp. 163-171, 2001.

