

Auszug aus dem Jahresbericht 2019  
Zur aktuellen Website: [www.ist.fraunhofer.de](http://www.ist.fraunhofer.de)

## SIMULATION VON HWCVD-SILIZIUM-BESCHICHTUNGSPROZESSEN

Chemische Gasphasenabscheidung mittels des Heißdraht-CVD-Verfahrens (HWCVD) bietet die Möglichkeit, sowohl amorphe als auch nanokristallin dotierte und intrinsische Siliziumschichten mit hohen Raten bis zu 2 nm/s auf großen Oberflächen von bis zu 800 x 665 mm<sup>2</sup> herzustellen. In diesem Verfahren gibt es im Gegensatz zu anderen Technologien keinen hochenergetischen Ionenbeschuss, daher ist die resultierende Schichtspannung erheblich geringer. Die Optimierung dieser Prozesse hinsichtlich Schichteigenschaften und Homogenität ist aufgrund der komplexen Wechselwirkungen im Prozess und der Reaktionschemie sehr aufwendig. Am Fraunhofer IST wurde ein detailliertes Simulationsmodell der Gasphasen- und Oberflächenreaktionen in HWCVD-Siliziumabscheidungsprozessen mit Silan (SiH<sub>4</sub>) und Wasserstoff (H<sub>2</sub>) erstellt, um die Schichteigenschaften optimieren zu können.

### Der Lösungsansatz

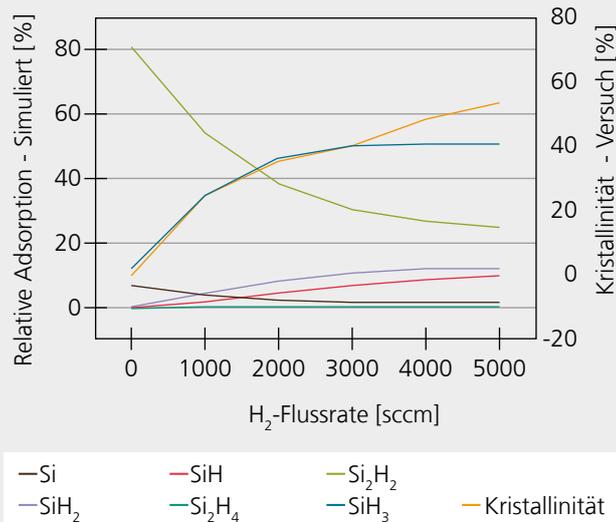
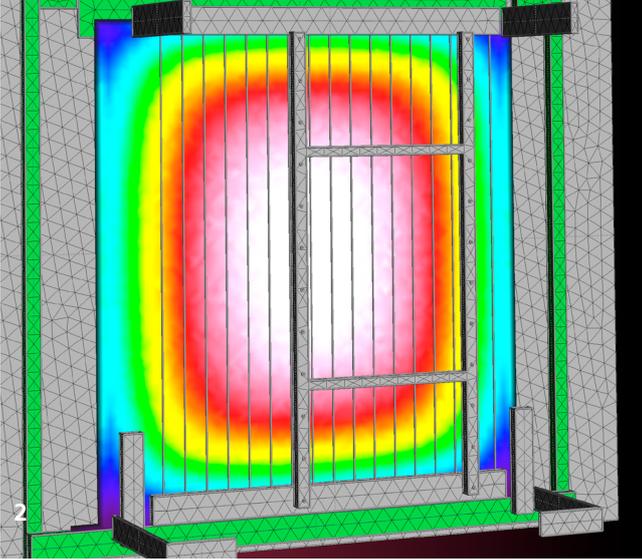
Am Fraunhofer IST wurde eine kinetische Simulationssoftware entwickelt, bei der die Direct Simulation Monte Carlo (DSM-C)-Methode eingesetzt wird, um Strömungs- und Transportprozesse in Niederdruck-Beschichtungsprozessen abzubilden. Basierend auf dieser Software und auf Daten aus zahlreichen HWCVD-Experimenten wurde ein detailliertes Modell des Silizium-Abscheidungsprozesses entwickelt. Dieses zielt insbesondere auf ein Verständnis des Einflusses der Prozessparameter auf die Schichtmorphologie (amorph oder mikrokristallin) ab. Das neue Modell berücksichtigt neben den Prozessgasen SiH<sub>4</sub> und H<sub>2</sub> auch atomaren Wasserstoff sowie Silanradikale wie SiH<sub>3</sub> oder SiH<sub>2</sub>, wobei insbesondere der atomare Wasserstoff die Kristallinität der abgeschiedenen Schichten beeinflusst. Neben der Gasphasenchemie wurde zusätzlich ein Oberflächenmodell bestehend aus atomar gebundenem Silizium, Dangling Bonds und Wasserstoffpassivierung aufgestellt.

### Validierung des Simulationsmodells

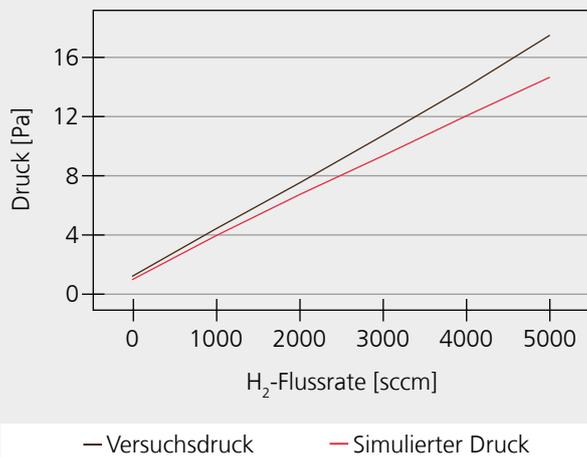
Das neue Modell wurde mit einer experimentellen Parameterstudie verglichen. Die gemessenen Daten umfassen den Totaldruck, die Abscheiderate sowie massenspektrometrische Messungen des Silan-Umsatzes. Nach erfolgreicher Validierung des Simulationsmodells wurde in weiteren Simulationsläufen der Einfluss des Wasserstoffpartialdrucks auf die Adsorptionsdynamik spezifischer Silanspezies an der Substratoberfläche untersucht.

Die Ergebnisse der Simulationsserie und zugehöriger Experimente bestätigen die bisherige Theorie, wonach Spezies mit höherer Oberflächenbeweglichkeit wie SiH<sub>3</sub> und Si<sub>2</sub>H<sub>4</sub> zu kristallinen Schichten führen, während Spezies mit geringerer Oberflächenbeweglichkeit wie SiH, SiH<sub>2</sub> und Si<sub>2</sub>H<sub>2</sub> zu einem amorphen Schichtenwachstum führen. Experimentell führt eine Zunahme des Drucks oder Wasserstoffstroms zu einer Zunahme der Kristallinität der Schichten, wobei die Simulation auch eine entsprechende Zunahme der SiH<sub>3</sub>- und eine Abnahme der Si<sub>2</sub>H<sub>2</sub>-Konzentrationen zeigt.





Simulierte Speziesadsorption am Substrat als Funktion von Wasserstoff.



Simulierter Partialdruck von SiH<sub>3</sub>-Spezies unter stationären Prozessbedingungen.

- 1 Simulierter Partialdruck von SiH<sub>3</sub>-Spezies unter stationären Prozessbedingungen.
- 2 3D-HWCVD-Kammergeometrie von Pflug et al.

### Ausblick

Diese Arbeit demonstriert ein virtuelles Werkzeug zur Prozessverbesserung der Siliziumabscheidung mittels HWCVD unter Minimierung zeit- und kostenaufwendiger experimenteller Studien. Weitere Verfeinerungen des Modells bzgl. wasserstoffbasierter Ätzreaktionen sowie der Integration von Dotierstoffen wie Bor oder Phosphor in die Prozesschemie sind in Planung. Ziel ist es, ein virtuelles Abbild einer vollständigen Prozesskette für siliziumbasierende pin-Strukturen im industriellen Maßstab zu erstellen.

### Das Projekt

Das Projekt wurde im Rahmen der internen Programme der Fraunhofer-Gesellschaft gefördert, Fördernummer MAVO 831 409.

### KONTAKT

Hunter King  
 Telefon +49 531 2155-641  
 hunter.king@ist.fraunhofer.de

Dr. Volker Sittinger  
 Telefon +49 531 2155-512  
 volker.sittinger@ist.fraunhofer.de