

Untersuchungen an diffusionsstabilen Aluminium-Silizium Barrieren für die Halbleiter in der Leistungselektronik

Dissertation

zur

Erlangung des akademischen Grades

Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

der Fakultät für Informatik und Elektrotechnik

der Universität Rostock

vorgelegt von

Mathias Karl Heinrich Plappert, geb. am 29.10.1985 in Bochum

aus Villach

Rostock, 14.02.2014

Gutachter:

1. Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. habil. Mathias Nowotnick
Institut für Gerätesysteme und Schaltungstechnik, Universität Rostock

2. Gutachter:

Prof. Dr.-Ing. Dr. sc. techn. Klaus-Dieter Lang
Fraunhofer-Institut für Zuverlässigkeit und Mikrointegration IZM
Fakultät Elektrotechnik und Informatik, Technische Universität Berlin

3. Gutachter:

Dr. sc. techn. Oliver Humbel
Infineon Technologies Austria AG

Datum der Einreichung: 24.02.2014

Datum der Verteidigung: 18.07.2014

Meinem Vater

Ergebnisse dieser Arbeit, die vorab veröffentlicht wurden

Plappert, Mathias ; Humbel, Oliver ; Koprowski, Angelika ; Nowottnick, Mathias:
»Characterization of Ti diffusion in PVD deposited WTi/AlCu metallization on
monocrystalline Si by means of secondary ion mass spectroscopy«. In: *Microelectronics
Reliability*, Bd. 52, S. 1993-1997, 2012

Fugger, Michael ; Plappert, Mathias ; Schaeffer, Carsten ; Humbel, Oliver ; Hutter,
Herbert ; Danninger, Herbert ; Nowottnick, Mathias: »Comparison of WTi and WTi(N) as
diffusion barriers for Al and Cu metallization on Si with respect to thermal stability and
diffusion behavior of Ti«. In: *Microelectronics Reliability*, eingereicht am 26.08.2013 mit
der Referenznummer MR MR-D13-00494, 2013

Patente, die während der Dissertation eingereicht/ erteilt wurden

US/CN/DE Patentanmeldung: Infineon Technologies, Plappert, Mathias ; Schulze, Hans-
Joachim: »Semiconductor Structure, Semiconductor Device Having a Semiconductor
Structure, and Method for Manufacturing A Semiconductor Structure«. 13/472,949, 2012,
CN103426905A

US Patentanmeldung: Infineon Technologies, Werber, Dorothea ; Plappert, Mathias ;
Pfirsch, Frank ; Gutt, Thomas: »IGBT with emitter electrode electrically connected with an
impurity zone«. 13/941,829, 2013

US Patentanmeldung: Infineon Technologies, Schäffer Carsten ; Plappert, Mathias ;
Humbel, Oliver ; Koprowski, Angelika: »Semiconductor Device Having A Corrosion
Resistant Metallization, And Method For Manufacturing Thereof«. 14/068,398, 2013

Kurzfassung

Die Leistungselektronik erfordert aufgrund der hohen betriebswirtschaftlichen Wertschöpfung und der Produktzuverlässigkeit eine stetige Weiterentwicklung der Halbleiterchips. Das Metallisierungssystem besitzt dabei einen hohen Stellenwert, da es das Bindeglied zwischen Einzel- und Gesamtsystem darstellt. Die Integration einer Diffusionsbarriere steigert die Qualität und Ausbeute sowohl in der Chip- als auch in der Modulfertigung, da sie den Einsatz einer Si-freien Al-Metallisierung ermöglicht. Diese Änderung setzt jedoch eine detaillierte Kenntnis der Barrierenwerkstoffe und deren Einfluss auf einen Leistungshalbleiter voraus.

Die vorliegende Arbeit untersucht WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren. Die werkstoffphysikalischen Eigenschaften werden in Abhängigkeit des Sputterprozesses umfangreich evaluiert. Dies geschieht sowohl experimentell, theoretisch als auch simulativ. Der Einfluss der Dünnschichtcharakteristika auf die Barrierenstabilität wird mit Hilfe von Beschleunigungstests und analytischen Methoden ermittelt. Anhand der Ergebnisse wird erstmalig gezeigt, dass die Ti-Diffusion aus der WTi-Dünnschicht den Fehlermechanismus bei einem Versagen der WTi-Barriere darstellt. Die Ermittlung des Fehlermechanismus und dessen Aktivierungsenergie bilden die Grundlage für eine verbesserte WTi-Diffusionsbarriere. Es wird gezeigt, dass der reaktive Sputterprozess von WTiN-Dünnschichten den Fehlermechanismus unterbindet und eine höhere Temperaturstabilität gegenüber Diffusion von Al und Si ermöglicht.

Die Integration von langzeitstabilen Diffusionsbarrieren auf Leistungshalbleitern ist ein weiterer Bestandteil dieser Arbeit. Es wird gezeigt, dass die Prozessschritte zur Abscheidung und Strukturierung der Barrierenschicht einen hohen Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften, die Temperaturstabilität und die Bondrobustheit des Leistungshalbleiters besitzen.

Abstract

Power Semiconductors are requiring a continuous improvement because of a high value creation and product reliability in Power Electronics. The metallization system as a link between an individual system and a complete system has a high priority in case of improvements. The integration of a diffusion barrier enhances the quality and rate of yield in semiconductor and module production because of the possibility to use a Si-free Al-metallization. The modification supposes a detailed knowledge in barrier materials and their influence on Power Semiconductors.

The present thesis investigates WTi- and WTiN-diffusion barriers. The physical and chemical properties were evaluated on the basis of experimental, theoretical and simulation data as a function of the sputtering process. The influence of the thin film characteristics on barrier stability is analyzed with the help of accelerated reliability tests and analytical methods. Based on these results it is shown for the first time that Ti-diffusion out of WTi is the main failure mechanism of WTi-diffusion barriers. The determination of the failure mechanism and its activation energy is building the fundament for an improved WTi-diffusion barrier. It is shown that the reactive sputtering process for WTiN-thin films is blocking the failure mechanism and therefore enables higher temperature stability against diffusion.

The integration of long term stable diffusion barriers is a further constituent of this work. It is shown that the process steps for deposition and structuring the barrier thin film have a significant impact on electrical performance, temperature stability and bond robustness of a Power Semiconductor device.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung.....	i
Abstract.....	iii
1 Einleitung.....	1
2 Theoretische Grundlagen.....	3
2.1 Leistungshalbleiter.....	3
2.1.1 Einleitung.....	3
2.1.2 Die Leistungsdiode.....	4
2.1.3 Der IGBT.....	7
2.2 Diffusion von Aluminium und Silizium.....	10
2.2.1 Fehlerfall Aluminium-Spiking.....	10
2.2.2 Stand der Technik „AlSiCu“.....	12
2.2.3 Ersatz des AlSiCu durch eine Diffusionsbarriere.....	14
3 Experimentelle Grundlagen.....	16
3.1 Herstellung von Dünnschichten.....	16
3.1.1 PVD-Sputtern.....	16
3.1.2 Ätzen.....	19
3.2 Charakterisierung von Dünnschichten.....	21
3.2.1 Schichtstress.....	21
3.2.2 Stöchiometrie.....	22
3.2.3 Rasterelektronenmikroskopie.....	22
3.2.4 Focused Ion Beam Mikroskopie.....	23
3.2.5 Transmissionselektronenmikroskopie.....	24
3.2.6 Röntgendiffraktometrie.....	25
3.2.7 Photoelektronenspektroskopie.....	26
3.2.8 Auger-Elektronenspektroskopie.....	27
3.2.9 Sekundärionen-Massenspektrometrie.....	28
3.2.10 Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzspektroskopie.....	30
3.2.11 Schichtwiderstand.....	30
3.2.12 Kontaktwiderstand zu Si.....	31
4 Werkstoffe für Diffusionsbarrieren.....	33
4.1 Diffusionsstabilität.....	33
4.2 Integration in Leistungshalbleiter.....	35
4.3 Auswahl des Barrierenmaterials.....	36
5 Ergebnisse und Interpretation.....	39
5.1 Voruntersuchungen zu Wachstumsmechanismen von Al-Spikes.....	39

5.2	Experimentelle Herstellung der Testwafer	45
5.3	Herstellung der WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren	48
5.3.1	PVD-Sputterabscheidung.....	48
5.3.2	Untersuchung der Mikrostruktur	64
5.3.3	Interpretation der Ergebnisse	73
5.4	Herstellung von Al-Metallisierungen im PVD-Verfahren.....	74
5.5	Temperaturstabilität von WTi und WTiN als Diffusionsbarriere.....	75
5.5.1	Detektion des Ausfallmechanismus von WTi.....	75
5.5.2	Ermittlung der Aktivierungsenergie für den Ausfallmechanismus	80
5.5.3	Einfluss der Stöchiometrie von WTi	86
5.5.4	Unterdrücken des Fehlermechanismus durch reaktives Sputtern mit N ₂	89
5.5.5	Interpretation der Ergebnisse	94
5.6	Herstellung und Charakterisierung von Leistungshalbleitern mit Diffusionsbarriere.....	94
5.6.1	Einleitung.....	94
5.6.2	PVD-Sputter-Abscheidung	95
5.6.3	Strukturierung	96
5.6.4	Elektrische Eigenschaften.....	100
5.6.5	Bondbarkeit.....	106
5.6.6	Interpretation der Ergebnisse	111
5.7	Weitere Anwendungsmöglichkeiten von WTi und WTiN	112
5.8	Diskussion der Ergebnisse	113
6	Zusammenfassung.....	118
7	Ausblick	120
7.1	Ta und TaN als Diffusionsbarriere	120
A	Anhang.....	125
A.1	Ti-Diffusionsprofile	125
A.2	Relative Ti-Intensität	126
A.3	XPS-Detailspektren	127
	Abkürzungsverzeichnis	130
	Symbolverzeichnis	132
	Abbildungsverzeichnis	134
	Tabellenverzeichnis	140
	Literaturverzeichnis	141
	Danksagung.....	151
	Erklärung.....	153

Thesen..... 155

1 Einleitung

Leistungselektronik ist eine Schlüsseltechnologie um die zunehmende Elektrifizierung im Verkehrswesen und die nachhaltige Energieversorgung mit erneuerbaren Energien zu realisieren. In modernen Hybridfahrzeugen, in Zügen des Nah- und Fernverkehrs und in Windkraftanlagen wird die Leistungselektronik eingesetzt um eine elektrische Energie in die benötigte Form umzuwandeln. Am Beispiel eines Fernverkehrszuges wird über eine Kombination aus Gleich- und Wechselrichterschaltungen die einphasige Netzspannung (15000 V, $16^{2/3}$ Hz) in eine variable dreiphasige Drehspannung umgewandelt. Die Basis dieser Umrichter sind IGBT-Schalttransistoren und Dioden mit einer maximalen Sperrspannungsfestigkeit von bis zu 6500 V. Ein Umrichtermodul wird mit bis zu 36 dieser Leistungshalbleiter bestückt, um eine Stromtragfähigkeit von bis zu 1000 A zu erzielen. In einem modernen Hochgeschwindigkeitszug sind wiederum bis zu 120 dieser Module verbaut.

Die Kette der Wertschöpfung solcher Umrichtermodule startet in der Chipfertigung und endet am fertigen Modul. Die Verbindung der Leistungshalbleiter mit dem Modul erfolgt über Bondprozesse auf der Chipmetallisierung. In einem Modul werden bis zu 625 Bondungen auf Leistungshalbleiterchips ausgeführt. Jeder einzelne Bondausfall dieser 625 Verbindungen bedeutet schlechtestenfalls den irreparablen Verlust des Moduls am Ende der Wertschöpfungskette. Zudem werden Forderungen an eine höhere Lastwechselfähigkeit der Bondverbindungen gestellt, die den Einsatz stärkerer Bondverformungen und härterer Drähte notwendig machen.

Diese Herausforderungen können durch den Einsatz einer Si-freien Al-Chipmetallisierung gelöst werden. Eine solche Metallisierung setzt jedoch den Einsatz einer integrierten Diffusionsbarriere voraus, welche die Reaktion zwischen Si-Substrat und Al unterbindet. Solche Diffusionsbarrieren stehen seit Ende der 1980er Jahre im Interesse der Halbleiterforschung. Die Untersuchungen fokussieren jedoch auf die Anwendung von Kupfermetallisierungen und deren Barrieren zum Kontaktieren von Strukturen der Dual-Damascene-Technik.

Diese Arbeit beschäftigt sich hingegen mit der direkten Anwendung einer Diffusionsbarriere auf Si. Sowohl die Stabilität gegenüber Diffusion, als auch die Integration auf einem Leistungshalbleiter werden hierbei im Vordergrund gestellt. Nach einer theoretischen Einführung in die Leistungshalbleiter wird der Stand der Technik von Al-Metallisierungen gezeigt und die Nachteile dargestellt. Die nachfolgenden experimentellen Grundlagen stellen die angewandten Analysemethoden und deren Anwendungsfelder dar. Im Hauptteil der Arbeit fällt die Werkstoffauswahl für

Diffusionsbarrieren auf WTi-Dünnschichten, deren Barrierenstabilität und Integrierbarkeit in eine Leistungshalbleitertechnologie geprüft werden. Bei der Bewertung der Diffusionsstabilität können aufgrund der stetigen Weiterentwicklung der Analysemethoden erstmalig neue Erkenntnisse bezüglich des Fehlermechanismus von Diffusionsbarrieren gewonnen werden. Für die Integration der Diffusionsbarriere in einem Leistungshalbleiterchip werden die erforderlichen Prozessschritte in der Chipherstellung bewertet und der Einfluss auf die elektrischen Eigenschaften gezeigt. Bei der abschließenden Fertigungsuntersuchung der Bondbarkeit werden die Forderung nach einer hohen Ausbeute und die Möglichkeit zum Erhöhen der Bondparameter (US-Leistung und Bonddrahtverformung) überprüft. Im Ausblick werden Ergebnisse von Ta-Dünnschichten als Diffusionsbarriere gezeigt und deren Potential zur Anwendung auf Leistungshalbleitern erläutert.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die Langzeitstabilität von Diffusionsbarrieren zu überprüfen und die Realisierbarkeit eines Leistungshalbleiters mit Diffusionsbarriere von der Chip- bis zur Modulherstellung nachzuweisen. Die Alterungsmechanismen der Barrierendünnschichten und die Integration in die Herstellungsprozesse stehen dabei im Vordergrund.

2 Theoretische Grundlagen

2.1 Leistungshalbleiter

2.1.1 Einleitung

Der Begriff Halbleiter beschreibt einen Werkstoff, dessen spezifischer elektrischer Widerstand zwischen dem eines Metalls und eines Isolators liegt. Der Temperaturkoeffizient des elektrischen Widerstands ist negativ, sodass dieser sinkt, wenn die Temperatur steigt. Das Element Silizium ist der wichtigste Halbleiter und heutzutage Bestandteil der meisten Halbleiterbauelemente. Der Leitungsmechanismus kann prinzipiell die Eigenleitung und die Störstellenleitung unterschieden werden. Die Eigenleitung beschreibt den temperaturabhängigen, elektrischen Ladungstransport von einem undotierten Halbleiter. Bei 0 K ist ein reiner Halbleiter ein Isolator, da die Elektronen an die Atomrümpfe fest gebunden sind. Bei höheren Temperaturen können die Elektronenpaarbindungen aufgebrochen werden, sodass ein Ladungstransport durch ständig neu entstehende Elektronenleerstellen und Auffüllungen stattfinden kann. Die Störstellenleitung basiert auf einer von außen eingebrachten Donator- oder Akzeptordotierung. Donatoren geben nach ihrem Einbau ins Si-Gitter Elektronen ab, wodurch zusätzliche Elektronen für den Ladungstransport zur Verfügung stehen. Diesen Leitungsmechanismus nennt man Elektronenleitung (n-Leitung). Akzeptoren verursachen hingegen zusätzliche Elektronenlöcher, über deren Freistellen Elektronen wandern können. Diesen Leitungsmechanismus bezeichnet man als Löcherleitung (p-Leitung) [1]. Halbleiterbauelemente bestehen zumindest aus einem Übergang von Elektronenleitung zu Löcherleitung, dem sogenannten pn-Übergang. An diesem Übergang treffen ein p- und ein n-dotierter Bereich direkt aufeinander. Der folgende Ladungsträgeraustausch infolge des Konzentrationsgradienten beinhaltet sowohl Elektronen, die sich aus dem n-Gebiet in Richtung p-Gebiet bewegen, als auch Löcher, welche aus dem p-Gebiet in Richtung n-Gebiet fließen (Diffusionsstrom). Es entsteht eine Raumladungszone (RLZ), die eine sehr geringe Leitfähigkeit aufweist. Das in der RLZ gebildete elektrische Feld wirkt wiederum einer weiteren Diffusion von Ladungsträgern entgegen (Driftstrom). Die Breite der RLZ kann durch Anlegen einer externen Spannung verändert werden. Je nach Polarität dieser angelegten Spannung ist entweder die Durchlassrichtung oder die Sperrrichtung vorgegeben.

Leistungshalbleiter werden in der Leistungselektronik benutzt, um bereitgestellte elektrische Energie in eine vom Verbraucher benötigte Form umzuwandeln. Sie dienen als elektronische Schalter beispielsweise in Wechsel- oder Gleichrichterschaltungen [2]. Diese

gehören zu der Klasse der Umrichter und können einerseits aus mehrphasiger Wechselspannung eine Gleichspannung (Gleichrichter) bzw. andererseits aus einer Gleichspannung eine Wechselspannung mit vorgegebener Amplitude und Frequenz (Wechselrichter) erzeugen. Zu Leistungshalbleitern zählen unter anderem IGBT-Transistoren, Bipolartransistoren, Thyristoren und Leistungsdioden. Die Transistorarten zeichnen sich aufgrund ihrer Bipolarstruktur durch geringe Durchlassverluste und hohe Stromtragfähigkeit aus. Der IGBT wird jedoch über ein elektrisches Feld in einem isoliertem Gate spannungsgesteuert, was zu Vorteilen in der Komplexität und den Ansteuerverlusten gegenüber dem Bipolartransistor führt. Aufgrund geringer Schaltverluste sind vergleichsweise hohe Schaltfrequenzen möglich [3]. Daher werden bei drehzahlvariablen Maschinen mit variabler Frequenz und Amplitude meist IGBTs eingesetzt. Diese Vorteile macht sich inzwischen auch die Bahntechnik zu nutzen, sodass vorwiegend IGBTs die Steuerung in der Leistungselektronik übernehmen und Thyristoren ersetzen. IGBTs werden in Pulswechselrichtern als Schalttransistoren und Dioden als antiparallele Freilaufdioden eingesetzt [4]. Die Spannungsklassen in diesem Anwendungsfeld betragen typischerweise zwischen 1200 V und 6500 V. Auch in Hybridfahrzeugen finden Leistungshalbleiter ihren Einsatz. In Gleichspannungswandlern (DC/DC) sind sie das Verbindungsglied zwischen Hochvoltbordnetz inklusive der Hochvoltbatterie (≥ 400 V) und dem 12 V-Bordnetz. In Umrichterschaltungen werden sie in Gleich- oder Wechselrichtern eingesetzt. Für Spannungen im Hochspannungsbordnetz bis 450 V werden 600 - 650 V IGBTs genutzt. Höhere Spannungsebenen werden mit ≥ 1200 V Typen ausgestattet [3]. Die folgenden Kapitel geben einen kurzen Überblick über die physikalischen Eigenschaften und den Aufbau eines IGBT-Transistors und einer Leistungsdiode, wie sie typischerweise in Gleich- und Wechselrichterschaltungen eingesetzt werden.

2.1.2 Die Leistungsdiode

Die Diode ist ein Halbleiterbauelement, in dem ein pn-Übergang technologisch realisiert ist. Der Strom kann im Wesentlichen nur in eine Richtung, der Durchlassrichtung, fließen. In Abbildung 2.1 ist die Kennlinie einer pn-Diode schematisch dargestellt. In Durchlassrichtung ist der Spannungsabfall u_F über die Diode in Abhängigkeit des fließenden Stroms i_F gezeichnet. Es ist erkennbar, dass die Diode ab einer bestimmten Spannung leitet und Strom fließen kann. Dies ist auf die Verkleinerung der RLZ zurückzuführen. Wird diese komplett abgebaut, kann eine fortwährende Rekombination der Ladungsträger an der Grenzschicht von p zu n stattfinden und es fließt Strom. In Sperrrichtung fließt bei angelegter Sperrspannung u_R ein Sperrstrom i_R , der gegenüber dem Durchlassstrom sehr klein ist [5]. Ab einem bestimmten Spannungswert wird die Diode allerdings abrupt leitfähig, was als Durchbruch bezeichnet wird. Dieser tritt ein, sobald die

RLZ die Randlektroden erreicht. Eine andere Art des Durchbruchs ist der sogenannte *Avalanche*-Durchbruch. Mit zunehmender Breite der RLZ vergrößert sich auch der Betrag des elektrischen Feldes. In einer RLZ befinden sich stets freie Ladungsträger. Ein einzelnes Elektron kann bei einer sehr hohen elektrischen Feldstärke so viel Energie aufnehmen, dass es beim Zusammenstoß mit einem Siliziumatom zur Stoßionisation kommt. Die Folge dieser Ionisation ist ein zusätzliches Elektron-Loch-Paar, welches durch ein herausgeschlagenes Valenzelektron im Siliziumatom entsteht. Dieses Elektron-Loch-Paar kann weitere Zusammenstöße bewirken und eine Art Kettenreaktion ist die Folge. Dies ist der so genannte *Avalanche*-Durchbruch [2].

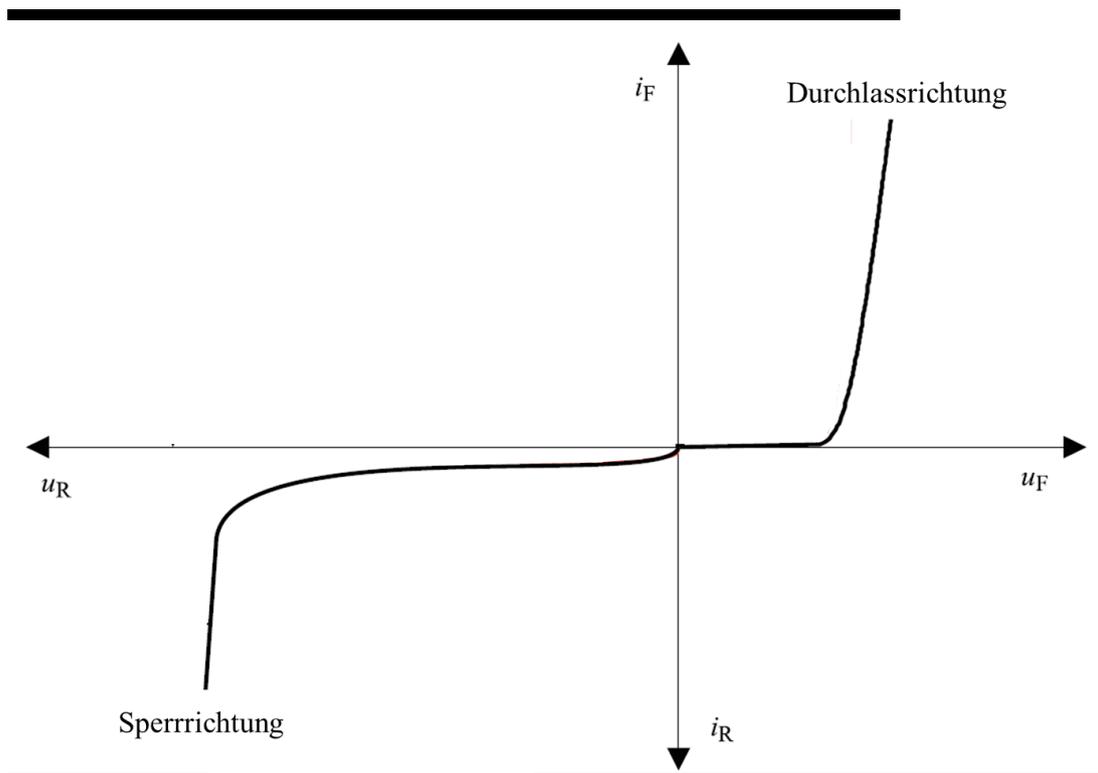


Abbildung 2.1: Kennlinie einer pn-Diode. Der Maßstab der y-Achse ist für die Durchlasskennlinie (i_F) und die Sperrkennlinie (i_R) unterschiedlich [2].

In einer Leistungsdiode wird der p- und n-Bereich um eine zusätzliche schwach dotierte Zwischenschicht erweitert. In den meisten Fällen ist dies ein n-Gebiet. Diese Kombination wird als pin-Diode bezeichnet (i: intrinsisch). Eine solche pin-Diode besitzt aufgrund der geringen Eigenleitung der Zwischenschicht höhere Durchlassverluste, besteht jedoch eine höhere Durchbruchspannung, da sich das elektrische Feld noch zusätzlich in den intrinsischen Bereich erstrecken kann. In Abbildung 2.2 ist der Aufbau einer pin-Diode dargestellt. Als Basis wird bei der Herstellung ein sehr niedrig dotiertes Grundmaterial (n^-) verwendet, in dem mittels Implantation und Diffusion die p^+ - und n^+ -Bereiche eingebracht werden. Aufgrund dieses Aufbaus ergibt sich folgendes Schaltverhalten [5]:

- Bei Anlegen einer Spannung in Durchlassrichtung werden die RLZ am anodenseitigen p^+n^- - und am kathodenseitigen n^-n^+ - Übergang verkleinert und der Strom steigt exponentiell an. Der Stromfluss kann aufgrund von Rekombination stattfinden. Im Falle der pin-Diode wird der intrinsische Bereich von Ladungsträgern überschwemmt, wodurch die Rekombination im kompletten intrinsischen Bereich stattfindet. Die Diode leitet und die Durchlassverluste sind aufgrund der Ladungsträgerüberschwemmung vergleichsweise gering (Ladungsträgermodulation).
- Bei einem Ausschaltvorgang müssen die Ladungsträger aus dem intrinsischen Bereich wieder entfernt werden. Elektronen sind beweglicher als Löcher, sodass am pn-Übergang zuerst die Ladungsträgeranzahl verringert wird und sich die p^+n^- -RLZ erneut aufbauen kann.
- Im intrinsischen Gebiet (kathodenseitig) befinden sich immer noch Ladungsträger, die abgeführt werden müssen. Es fließt dementsprechend ein Rückstrom (*tail-Strom*) der gegen Null tendiert (*reverse recovery*). Falls zu wenig Ladungsträger vorhanden sind um den Strom langsam gegen Null zu bewegen, tritt der so genannte *snap-off* ein. Der Strom geht abrupt gegen Null (Rückstromabriss), was ein hohes di/dt und über Induktivitäten sehr hohe Spannungsspitzen und ein Zerstören des Bauteils nach sich ziehen kann.

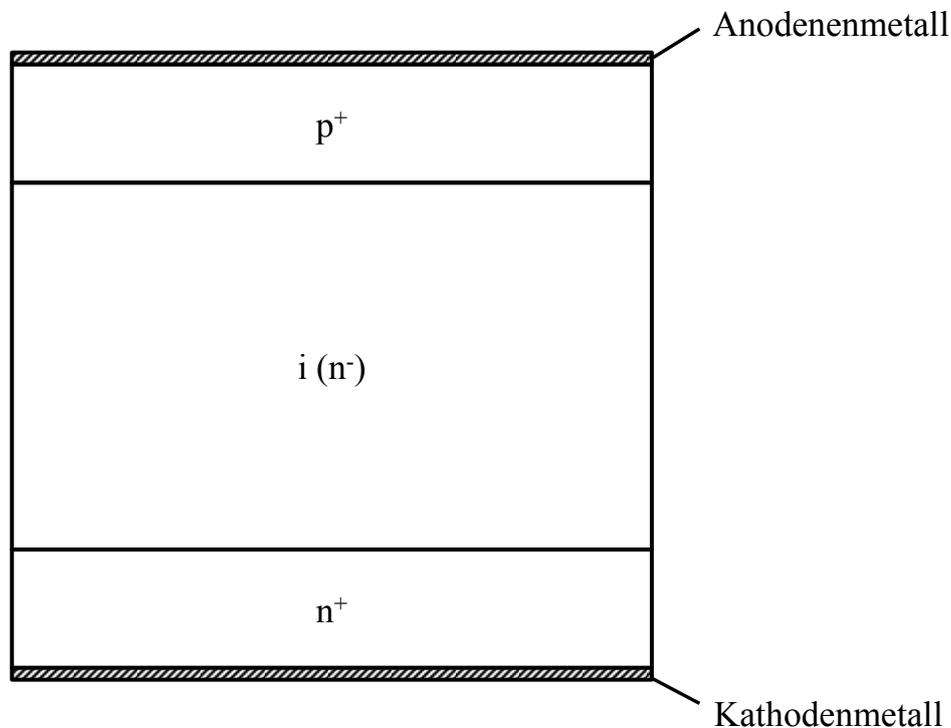


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung einer pin-Diode [5].

Um die beschriebene Ausräumung der Ladungsträger zu beschleunigen bzw. zu modellieren können ladungsträgerlebensdauerändernde Prozesse eingesetzt werden. Es

werden Rekombinationszentren in der Bandlücke erzeugt, welche die Trägerlebensdauer herabsetzen bzw. die Rekombinationsrate heraufsetzen. In Folge hoher Rekombinationsraten sind zwar höhere i_R - und u_F -Werte zu erwarten, es sinken jedoch die auszuräumenden Ladungsträger, was eine kürzere *reverse recovery*-Zeit bewirkt. Typische Elemente für solche Prozesse sind Gold oder Platin [6]. Zum einen besteht die Möglichkeit, dass diese Elemente in die Mittelzone eindiffundieren und dort Störstellen bilden. Sie führen sie zu Energieniveaus in der Bandlücke von Silizium, welche die Rekombination- und Generationsraten deutlich erhöhen.

2.1.3 Der IGBT

Der IGBT (*Insulated Gate Bipolar Transistor*) gehört zu der Familie der feldgesteuerten Bauelemente. Das bedeutet, dass die Leitfähigkeit des Substrats durch ein elektrisches Feld gesteuert wird. Sein schematischer Aufbau ist in Abbildung 2.3 dargestellt, wobei n Donatordotierung eine und p eine Akzeptordotierung im Silizium darstellt.

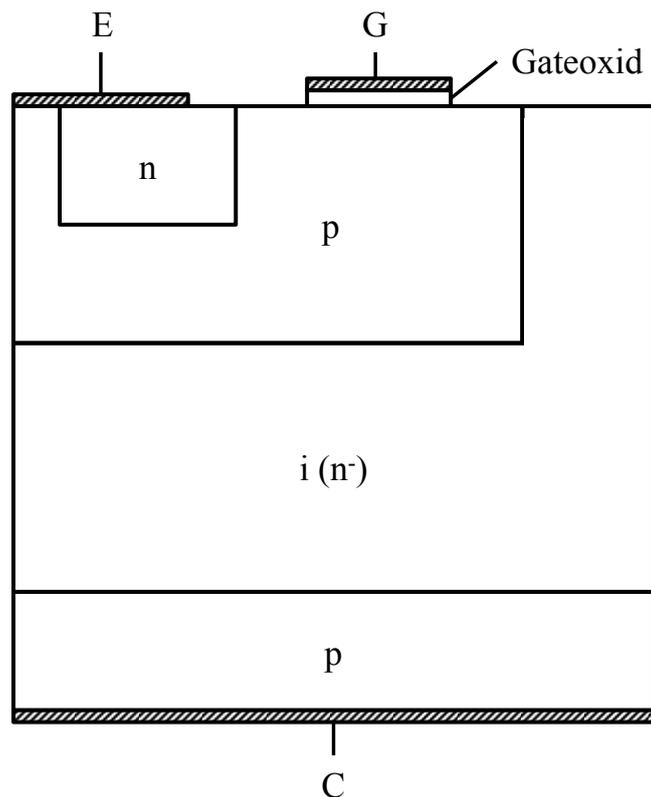


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung eines IGBT-Transistors [2].

Die Abkürzungen G, C und E bezeichnen die Gate-, Kollektor- und Emitter-Kontakte. Das Gate an der p-Wanne dient zur Ansteuerung des Transistors. Als Isolation befindet sich am Gate ein Siliziumoxid, das Gateoxid. Der Emitter ist überlappend an einen n-leitenden Bereich und an der p-Wanne angeschlossen. Basis des Transistors ist ein sehr niedrig

dotiertes und dementsprechend sehr hochohmiges n^- -Siliziumgrundmaterial. Der Kollektor befindet sich an einem p-dotierten Bereich und unterscheidet somit den IGBT von einem reinen vertikal-IG-Feldeffekttransistor (MOSFET).

Bei vereinfachter Betrachtung ergeben sich folgende Grundbetriebszustände:

- Im Grundzustand (positive Spannung zwischen Kollektor und Emitter und Gate unterhalb der Einsatzspannung) ist der IGBT-Transistor nicht leitfähig. Die Sperrfähigkeit wird über die Grunddotierung und die Dicke der n^- -Schicht definiert.
- Wird eine positive Spannung am Gate (U_G) angelegt, welche größer als die Schwellspannung ($U_{G\text{Eth}}$) ist, dann entsteht ein Elektronenkanal am Gate. Infolgedessen fließen Elektronen zum Kollektor und der pnp-Bipolartransistor wird eingeschaltet. Am kollektorseitigen pn-Übergang entsteht eine Spannung in Flussrichtung, die eine Löcherinjektion aus dem Kollektor nach sich zieht. Die hohe Ladungsträgerdichte in der niedrig dotierten n^- -Zone setzt die Leitfähigkeit hinauf und der IGBT befindet sich im leitfähigen Zustand [5]. Der Stromfluss wird hauptsächlich von der in Durchlassrichtung gepolten pin-Diode getragen.
- Wird U_G abgeschaltet oder auf einen negativen Wert eingestellt, so startet erneut die Sperrfähigkeit. Abhängig von den Kapazitäten zwischen Gate und Kollektor/Emitter bzw. dem eingesetzten Gatewiderstand (R_G) ergibt sich die Zeitkonstante für das Ausschalten. Schaltet der MOSFET ab, so können keine Ladungsträger mehr aus dem Mittelgebiet über die Basis abgeführt werden. Dies kann nunmehr nur noch über Rekombination erfolgen, welche vergleichsweise langsam ist [2]. Das Ausräumen der Ladungsträger verursacht den so genannten *tail*-Strom. Da in dieser Phase die Sperrspannung bereits anliegt, sind Verlustleistungen die Folge [5].

Diese beschriebenen Schalteigenschaften ergeben entscheidende Vorteile. Der IGBT-Transistor wird spannungsgesteuert, und dies unabhängig vom zu schaltenden Strom. Dies ist ein Vorteil gegenüber dem Bipolartransistor, welcher einen Basisstrom zum Schalten benötigt, der abhängig von dem zu schaltenden Strom ist. Der Vorteil gegenüber dem MOSFET-Transistor besteht in der Ladungsträgerüberschwemmung im n-Bereich, welche den Spannungsabfall bei hohen Stromdichten im Vergleich zum MOSFET deutlich reduziert.

In Abbildung 2.4 sind die Ersatzschaltbilder für den IGBT im Normalbetrieb und im Überlastfall dargestellt. Im Normalbetrieb besteht der IGBT aus einem MOSFET (T_1) und einem Bipolartransistor (T_2) (Abbildung 2.4.a). Der stromgesteuerte (pnp-) Bipolartransistor wird von dem MOSFET gesteuert. Der Wannenwiderstand (R_W) ist im Normalbetrieb sehr klein, sodass die Basis-Emitterstrecke kurzgeschlossen ist und T_3 überbrückt wird [2]. In Abbildung 2.4.b ist das Ersatzschaltbild eines IGBTs im

Überlastfall abgebildet. Ein weiterer (npn) Bipolartransistor (T_3) muss nun in das Ersatzschaltbild einbezogen werden, der über den Wannenwiderstand R_W angesteuert wird (Abbildung 2.4.b). Eine Überlast findet erst bei sehr hohen Strömen statt, was eine massive Erhöhung des Spannungsabfalls über der Kollektor- und Emittirstrecke zur Folge hat und wodurch hohe Verlustleistungen entstehen. T_3 wird in diesem Fall durch einen Stromfluss über R_W angesteuert. In diesem Fall ergeben T_2 und T_3 eine Thyristorstruktur. Im schlechtesten Fall führt dies zu einem „*latch-up*“ sobald die Thyristorstruktur „zündet“ und der Transistor verliert seine Steuerbarkeit [2]. Diese dynamischen elektrischen Eigenschaften sollen hier nur kurz erwähnt werden und werden im Laufe der Arbeit nicht weiter verfolgt. Im Zuge dieser Untersuchung wurde festgestellt, dass durch die Integration einer Diffusionsbarriere keine Veränderungen im dynamischen Betrieb der Leistungshalbleiterbauelemente, wie zum Beispiel beim Überstromabschalten, auftreten. Aus diesem Grund werden die Grundlagen dieses Betriebs hier nicht behandelt. Der Fokus in der vorliegenden experimentellen Auswertung liegt auf statischen Parametern wie zum Beispiel Durchbruchspannung U_{Br} , Schwellspannung U_{Th} und Kontaktwiderstände (R_C) auf n- bzw. p- Gebieten, welche durch eine Diffusionsbarriere beeinflusst werden können.

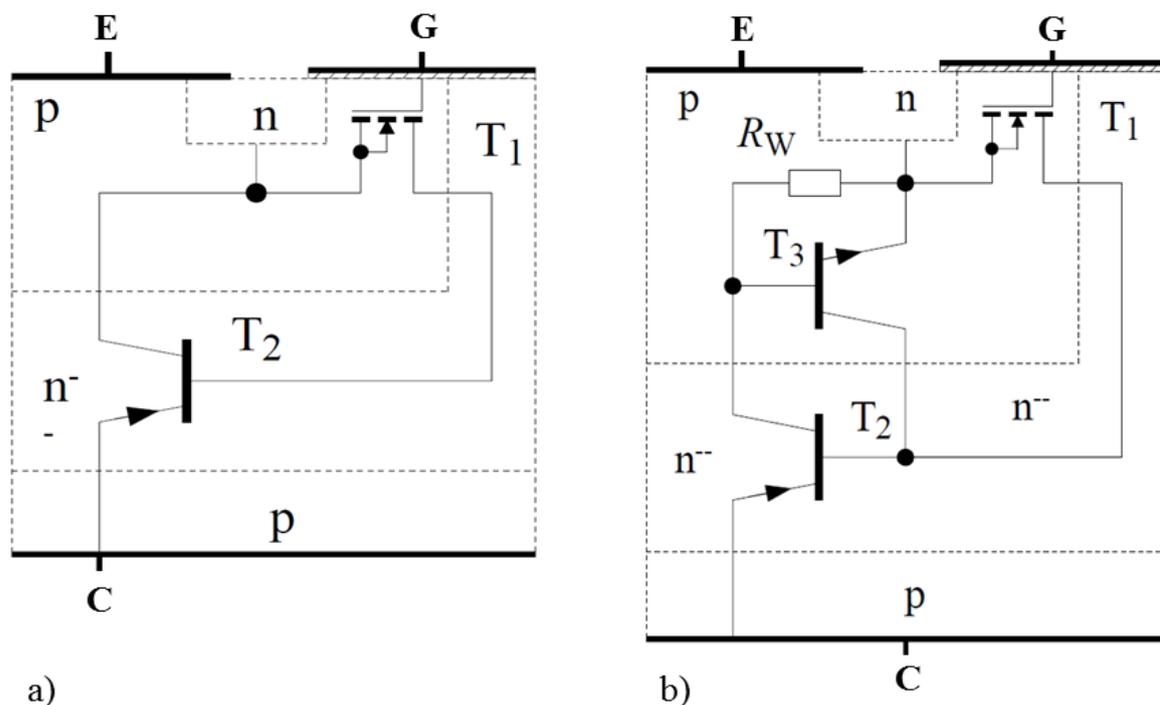


Abbildung 2.4: Ersatzschaltbild eines IGBTs a) vereinfacht für den Normalbetrieb und b) komplett für Normal- und Überlastbetrieb [2].

2.2 Diffusion von Aluminium und Silizium

2.2.1 Fehlerfall Aluminium-Spiking

Aluminium (Al) und Silizium (Si) reagieren unter bestimmten Voraussetzungen miteinander. In diesem Kapitel soll werkstoffphysikalisch gezeigt werden warum dies geschieht und weshalb daher diffusionsstabile Barrieren benötigt werden.

In Abbildung 2.5 ist das Phasendiagramm von Al und Si gezeigt. In der linken oberen Bildhälfte ist der bedeutende Bereich bezüglich des Al-Si-Metallisierungskontakts vergrößert dargestellt. An der Löslichkeitskurve von Si in Al lässt sich erkennen, dass Si ab einer Temperatur von circa 250 °C löslich ist. In gängigen Halbleiterprozessen werden nach der Metallisierungsabscheidung auf der Systemseite Temperaturbereiche ≤ 450 °C erreicht, in denen Si zu circa 0,5 Gew.-% löslich ist.

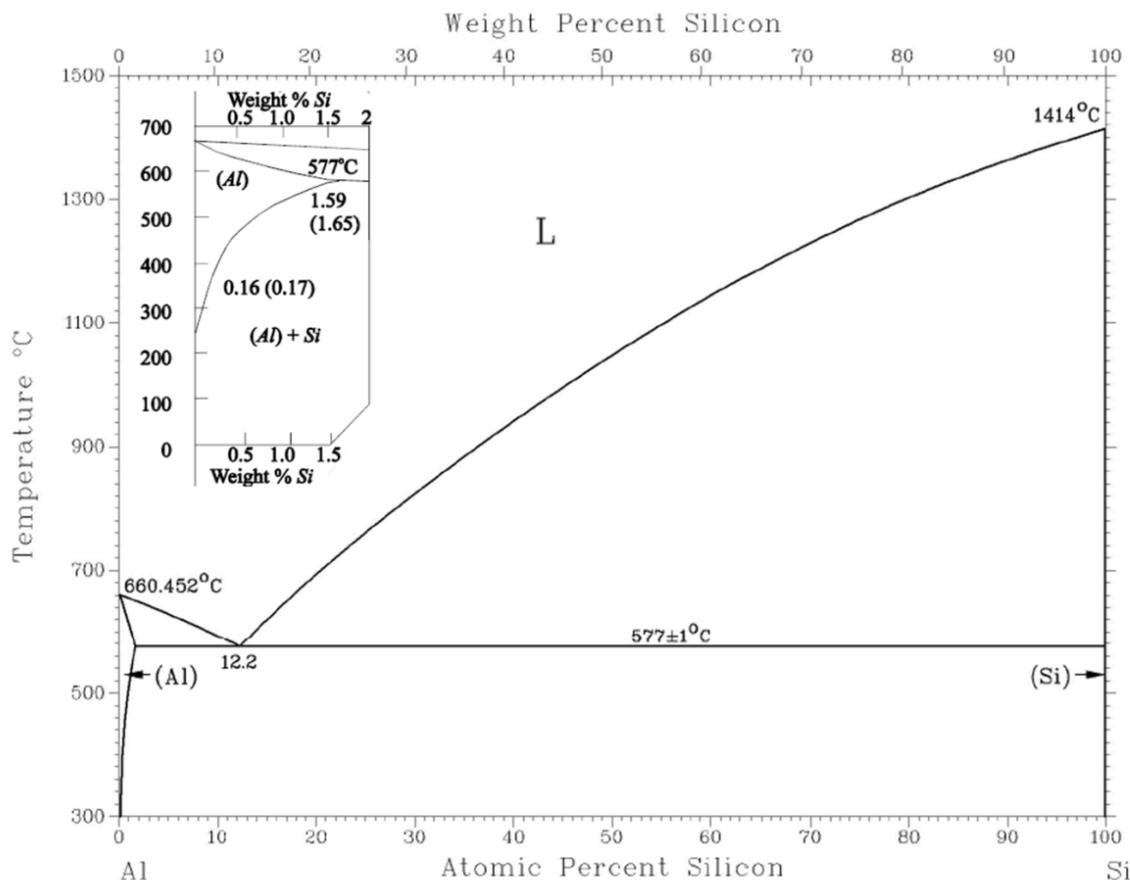


Abbildung 2.5: Phasendiagramm Aluminium-Silizium [7]. In der linken oberen Bildhälfte befindet sich eine Vergrößerung des Bereichs 0 - 2 Gew.-% Si.

Kommt Al in direkten Kontakt mit Si und wird im Prozess oder in der Anwendung die Verbindung über 250 °C erhitzt, dann kann sich Si in Al lösen. Aufgrund dieser Löslichkeit kommt es zu einem wirkenden Konzentrationsgefälle an der Grenzfläche. Die

stattfindende Diffusion von Si in Al kann vereinfacht über das 1. *Fick'sche* Gesetz (Gleichung (2.1)) beschrieben werden, welches den Diffusionsstrom J in Abhängigkeit vom Konzentrationsgradienten ($\partial c/\partial x$) darstellt [8]. Der Diffusionskoeffizient D ist temperatur- und materialabhängig [1].

$$J = -D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.1)$$

Für den speziellen Fall des Kontakts von Al mit einem Si-Einkristall ist D bei einer Temperatur unter 250 °C theoretisch gegen Null zu setzen, da davon auszugehen ist, dass die Si-Diffusion aus einem Si-Einkristall erst durch dessen Löslichkeit ermöglicht bzw. rapide beschleunigt wird [9]. Dies ist auf die energetisch stabile Verbindung des Kristalls zurückzuführen. Untersuchungen von *Dugan* und *Tskalakos* [10] zeigen jedoch, dass Si auch bei Temperaturen von 75 °C bis 150 °C in Al eindiffundieren kann. Deren Untersuchungen fanden allerdings an aufgedampftem, höchstwahrscheinlich polykristallinem Si statt. Da typische Halbleiter auch Kontakte aus polykristallinem Si (z.B. Gate-Kontakt) haben, kann also eine Diffusion auch unter 250 °C stattfinden.

Die Sättigung von Si in Al und somit das Stoppen der Diffusion ist abhängig von der Al-Schichtdicke. Zur näheren Betrachtung wird das 2. *Fick'sche* Gesetz (Gleichung (2.2)) herangezogen, welches die Änderung des Diffusionsstroms und der Konzentration in Abhängigkeit der Zeit t beschreibt [8].

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (2.2)$$

Die Si-Diffusion in Al hängt somit neben der Temperatur und der Zeit auch von dem sich ändernden Konzentrationsgradienten an der Eindringtiefe x ab. Dies bewirkt ein Herabsetzen der Diffusion mit sinkendem Konzentrationsgradienten. In unserem materialabhängigen Fall, für Al und einen Si-Einkristall, wird die Diffusion zusätzlich noch durch die temperaturabhängige Sättigung bestimmt. Bei dessen Erreichen ist keine weitere Diffusion zu erwarten, was sich mit den Ergebnissen aus Kapitel 5.5.1 bestätigen lässt. Im Si-Einkristall werden dabei Leerstellen erzeugt, welche wiederum vom Al aufgefüllt werden. Solche Auffüllungen werden Al-Spikes genannt, wie sie beispielsweise in Abbildung 2.6 dargestellt sind. In dieser Abbildung wurde die Sichtbarkeit der Spikes durch eine selektive Al-Oberflächenätzung erzielt. Vor allem in einer rasterelektronenmikroskopischen Aufsicht erleichtert diese Ätzung das Finden und Identifizieren der Spikes, da sie nun anhand von Gräben sichtbar werden. Al-Spikes sind in ihrer Größe abhängig von der Al-Schichtdicke und der Grenzfläche, an der die Diffusion stattfindet (Wachstumsmodell Kapitel 5.1). Eine Auswirkung auf die Charakteristik eines

Bauelementes erfolgt, wenn solche Al-Spikes in der Tiefe p/n-Übergänge kurzschließen oder Stromfilamentierungen nach sich ziehen. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass Al nur sehr schwer in einen unbeschädigten Si-Kristall diffundiert. Aufgrund der fehlenden Löslichkeit von Al in Si ist nur eine geringfügige Fremdstoffdiffusion mit hoher Aktivierungsenergie vorhanden [11]. In erster Instanz ist immer eine Si-Diffusion ausschlaggebend für den Fehlerfall Al-Spiking.

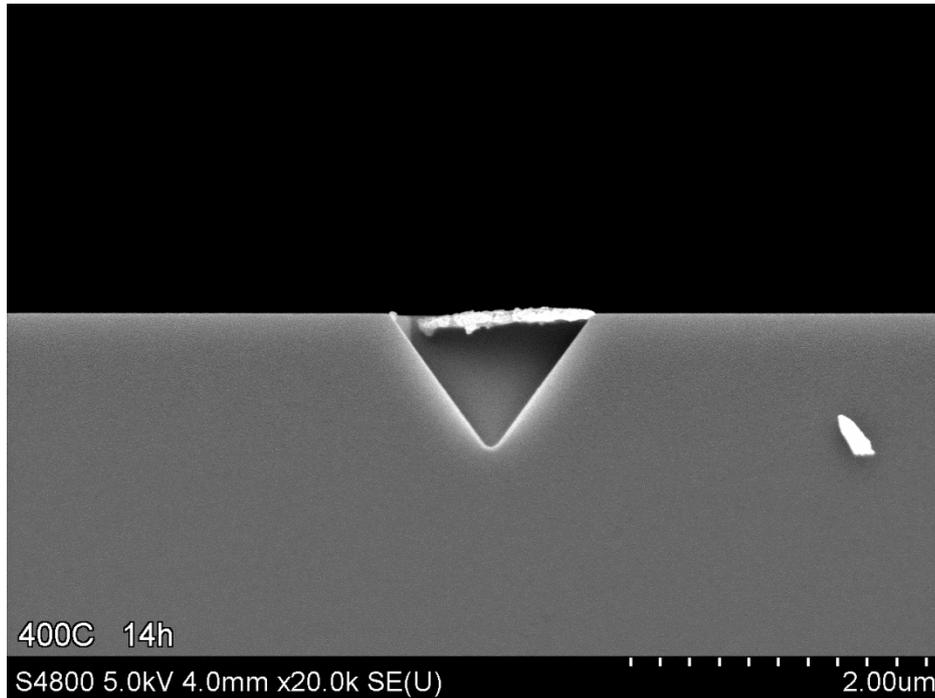


Abbildung 2.6: REM-Schliffbild eines Al-Spikes auf einem (100)-orientierten Si-Wafer. Die Al-Metallisierung wurde für verbesserte Sichtbarkeit der Spikes selektiv zu Si entfernt.

2.2.2 Stand der Technik „AlSiCu“

Um die in Kapitel 2.2.1 dargestellte Si-Diffusion mit daraus resultierenden Al-Spikes zu verhindern, wird eine Al-Metallisierung für Dünnschichten mit Si gesättigt [12]. Die Sättigung des Targets für das Sputterverfahren beträgt typischerweise 1 Gew.-% Si. Laut Phasendiagramm (Abbildung 2.5) reicht diese Sättigung bis über 500 °C, sodass eine Diffusion von Si aus dem Substrat für nachfolgenden Prozesse und Betriebszustände verhindert wird. Al und Si werden aufgrund der sehr ähnlicher Atommassen (Al: 26,98 u, Si: 28,09 u) gleichermaßen abgetragen, sodass sich in der Dünnschicht eine Sättigung von circa 1 Gew.-% einstellt (Kapitel 3.1.1). Während des Sputterprozesses löst sich Si aufgrund der hohen Wärmeentwicklung in Al, scheidet sich jedoch in der Abkühlphase wieder aus [13]. Diese Ausscheidungen führen zu Nachteilen. Bei der nasschemischen Strukturierung der Chipmetallisierung müssen Si-Ausscheidungen zusätzlich geätzt werden, da Al-Strukturierungsmethoden selektiv zu Si sind oder sein müssen. Zum anderen zeigen Untersuchungen, dass der Bondprozess von Si-Ausscheidungen stark beeinflusst wird. Onuki et al. [14] zeigen, dass Si-Ausscheidungen zum Beschädigen von

PSG (*Phosphorus Doped Silicate Glass*) führen können. Eine solche Schicht wird bei IGBT-Technologien häufig als Zwischendielektrikum (Dicke $>1 \mu\text{m}$) genutzt, um u.a. das Gate- vom Source-Potential zu trennen. Ein Zerstören dieser Schicht kann zum Ausfall eines Transistors und in der Modulfertigung zu hohen Ausbeuteverlusten führen. In Abbildung 2.7 sind derartige Si-Ausscheidungen dargestellt. Abbildung 2.7.a zeigt die Si-Ausscheidungen einer AlSiCu-Metallisierung mit 1 Gew.-% Si-Sättigung, nach Metallätzung selektiv zu Si. In metallisierungsfreien Chipbereichen müssen Si-Ausscheidungen, wie bereits erwähnt, zusätzlich geätzt werden. Abbildung 2.7.b zeigt die Gefahr dieser Ausscheidungen, da sie sehr nahe an der PSG-Trennschicht liegen. Beim Bonden kann es dazu kommen, dass die Si-Ausscheidungen die Trennschicht zerstören und ein Kurzschluss zwischen Gate- und Emitterpotential zum Ausfall führt.

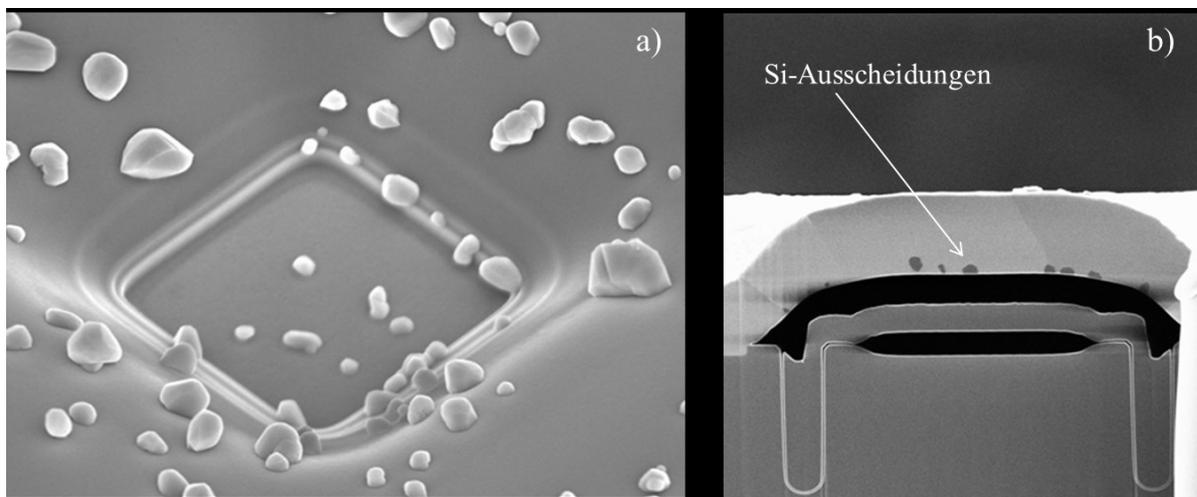


Abbildung 2.7: Si-Ausscheidungen in Al-Metallisierungen. a) REM-Aufsicht auf eine Halbleiterstruktur mit nasschemisch entferntem AlSiCu, b) FIB-Schnitt einer Halbleiterstruktur mit Si-Ausscheidungen nahe an PSG-Trennschichten.

Um Si-Ausscheidungen in ihrer Größe zu beeinflussen werden im Vergleich zu reinen Al-Abscheidungen reduzierte Temperaturen bzw. geringere Leistungen beim AlSiCu-Sputtern eingesetzt. Dadurch verringert sich die Löslichkeit und somit die Größe der Ausscheidungen. Derartig angepasste Prozesse führen produktionstechnisch zu Durchsatzverringern und metallurgisch zu kleineren Körnern und höherem Schichtstress (Kapitel 3.1.1). Untersuchungen auf IGBT-Modulebene von *Onuki et al.* [15] zeigen eine reduzierte Bondausbeute durch die Bildung von feinkörnigen Al-Metallisierungen. Der angepasste Prozess erschwert außerdem die Verfüllung von hohen Topographiestufen mit Al [12], was zu einer Einschränkung in der Bauform führt (Kapitel 3.1.1). Ein weiteres metallurgisches Problem wird unter anderem in der Untersuchung von *Hirashita et al.* erläutert [16]. Ein epitaktisches Wachstum des undotierten Si-Anteils im AlSiCu an Si-Kontaktlöchern kann zu einem Verschlechtern des elektrischen Kontaktes führen [12].

In einer Großvolumenfertigung werden zudem aufgrund hoher Qualitätsanforderungen automatische optische Kontrollen zur Beurteilung von Defekten eingesetzt. Si-Ausscheidungen, die trotz Ätzung immer noch aufliegen, können hierbei nicht differenziert werden und werden oft als Defekte eingestuft. Der betroffene Waferbereich wird als Ausschuss angesehen, was wiederum zu einem Ausbeuteverlust führt. Das Cu in der AlSiCu-Metallisierung dient sowohl der Erhöhung der Robustheit gegenüber Elektromigration durch vorwiegende Anlagerung des Cu oder Al_2Cu an den Al-Korngrenzen, als auch der geringfügigen Erhöhung der Härte im Vergleich zur AlSi-Metallisierung [12] [17]. Es sei jedoch an dieser Stelle erwähnt, dass die kritische Stromdichte von 10^5 A/cm^2 für Elektromigration bei Leistungshalbleiter, wie z.B. einem IGBT, aufgrund der ganzflächigen Metallisierung auf Source-Seite nicht erreicht wird. Bei einer überschlägigen Berechnung aus einem IGBT-Datenblatt der 150 A Klasse [18] ergibt sich eine Stromdichte von circa 800 A/cm^2 . Kritischen Stromdichten können beispielsweise bei IC-Technologien (*integrated circuit*) und Leiterbahnquerschnitten im nm-Bereich auftreten.

2.2.3 Ersatz des AlSiCu durch eine Diffusionsbarriere

Um die Reaktion von Al mit Si zu verhindern bietet sich der Einsatz einer passiven Schicht als Diffusionsbarriere als Alternative zur Sättigung der Al-Metallisierung mit Si an. Eine solche Barriere muss die Diffusion von Si in Al und somit auch die Bildung von Al-Spikes verhindern. Abbildung 2.8 zeigt eine WTi-Diffusionsbarriere in einem Kontaktloch eines Trench-IGBTs. Die in Kapitel 2.2.2 beschriebenen Nachteile des AlSi-Metalls sind nicht mehr vorhanden. Eine konforme Verfüllung des Kontaktlochs ist dabei möglich, da eine Leistungs-/Temperaturreduktion aufgrund des fehlenden Si-Anteils nicht mehr erforderlich ist. Aus der Abbildung geht hervor, dass keine Si-Ausscheidungen im Al vorhanden sind. Dies bietet die Möglichkeit härtere Bondparameter (z.B. Ultraschalleistung und Bondkraft) einzusetzen, um eine höhere Lastwechselfähigkeit zu erzielen [19]. Die Gefahr von Kurzschlüssen durch Si-induzierte PSG-Zerstörung ist deutlich reduziert. Bei der Prozessierung des hier dargestellten Metallisierungssystems konnte auf eine Ätzung der Si-Ausscheidungen verzichtet werden. Zudem ist die verwendete WTi-Diffusionsbarriere bezüglich der Abscheidung sehr konform (Kapitel 5.3.1) und führt zu einer zusätzlichen Barrierenwirkung gegenüber mobilen Ionen wie z.B. Na^+ (Kapitel 5.6.6).

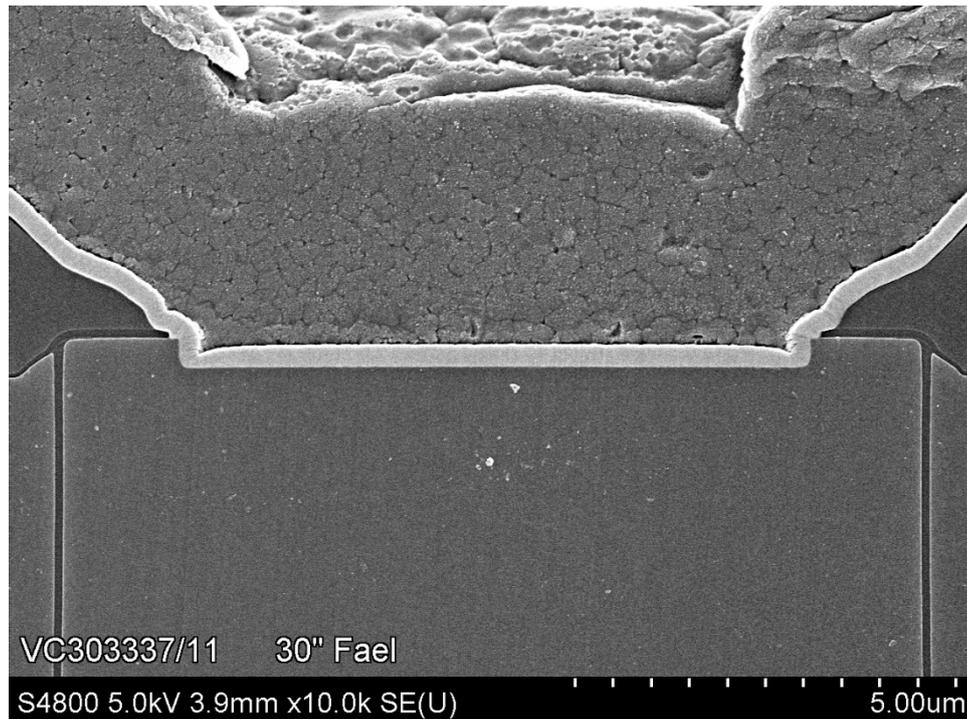


Abbildung 2.8: REM-Schliffbild eines Trench-IGBT-Transistors mit einer Diffusionsbarriere aus WTi (300 nm) und AlCu als Metallisierung (3200 nm).

In diversen Referenzen wie z. B. bei *Schwartz et al.* [12] sind Diffusionsbarrieren aufgelistet und bezüglich ihrer Halbleiteranwendungen beschrieben. Trotz der beschriebenen Vorteile ergeben Analysen von heute kommerziell erhältlichen Leistungshalbleiterprodukten, dass weitestgehend die Si-gesättigte AlSiCu-Metallisierung eingesetzt wird. Diffusionsbarrieren hingegen werden typischerweise in der IC-Fertigung verwendet. In dieser Anwendung ist gesputtertes TiN in Verbindung mit einer Wolfram-CVD-Abscheidung in sogenannten „*contact plugs*“ der Dual-Damascene-Technik Stand der Technik [12]. Es gelten hierbei jedoch deutlich reduzierte Randbedingungen bezüglich der abgeschiedenen Barrierenfläche und Bondparameter, welche den Einsatz dieser Technik ermöglichen.

3 Experimentelle Grundlagen

3.1 Herstellung von Dünnschichten

3.1.1 PVD-Sputtern

Zur Herstellung von elektrisch leitfähigen Dünnschichten z.B. auf Si-Wafern gibt es verschiedene Methoden. Im Zuge dieser Arbeit wurde das Sputterverfahren, auch Kathodenzerstäubung genannt, angewandt, welches zur Gruppe der PVD-Abscheidung (*Physical Vapour Deposition*) gehört. Grundsätzlich tragen hochenergetische Edelgasionen in einem Plasma durch ihre kinetische Energie neutrale Atome von einem Target ab, welche auf dem zu beschichtenden Substrat kondensieren. Das Verfahren zeichnet sich durch die Vorteile kontrollierte Stöchiometrie, *in situ* Sputterreinigung des Substrats, verbesserte Adhäsion und gut zu kontrollierende Schichtdicken im Vergleich zu anderen Verfahren aus. Der Einsatz einer zusätzlichen Bias-Leistung ist möglich, um Filmeigenschaften zu verbessern und Verfüllungen in hohen Topographien zu ermöglichen [12]. Zu beschichtende Materialien müssen zudem nicht über die Schmelzphase (wie z.B. beim Bedampfen) gehen. Somit können auch Materialien mit einem sehr hohen Schmelzpunkt, wie z.B. Wolfram, abgeschieden werden. Es sind, je nach Leistung, Schichtdicken von wenigen nm bis zu mehreren zehn μm möglich. Beliebige Schichtzusammensetzungen sind erzielbar, welche über die Targetstöchiometrie und Prozessparameter eingestellt werden [20]. Der Aufbau einer PVD-Sputterkammer ist in Abbildung 3.1 schematisch dargestellt.

Prinzipiell ist die Abscheidung in die drei Phasen Teilchenerzeugung, Transport und Schichtwachstum zu unterteilen. Während der Teilchenerzeugung wird eine Hochfrequenz- (HF) oder Gleichstrom-Gasentladung (DC) genutzt, um ein positiv geladenes Plasma mit z.B. Argon (Ar), Krypton (Kr) oder Xenon (Xe) zu erzeugen. Dieses Plasma wird typischerweise durch Anlegen einer Gleichspannung zwischen Chuck und Kathode bzw. einer Glimmentladung gezündet, wodurch die positiv geladenen Ionen zum Target beschleunigt werden. Dieser kinetische Eintrag bewirkt ein atomweises Abtragen des Targets, dessen Abscheiderate stark abhängig vom Atommassenverhältnis zwischen Edelgas- und Targetatom bzw. von der eingebrachten Energie und deren Einfallswinkel ist. Die Teilchenerzeugung findet bei Druckverhältnissen um 10^{-3} mbar statt. Zusätzlich kann ein statisches Magnetfeld an der Kathode durch einen rotierenden Permanentmagneten (Magnetron) die Sputterrate erhöhen [21].

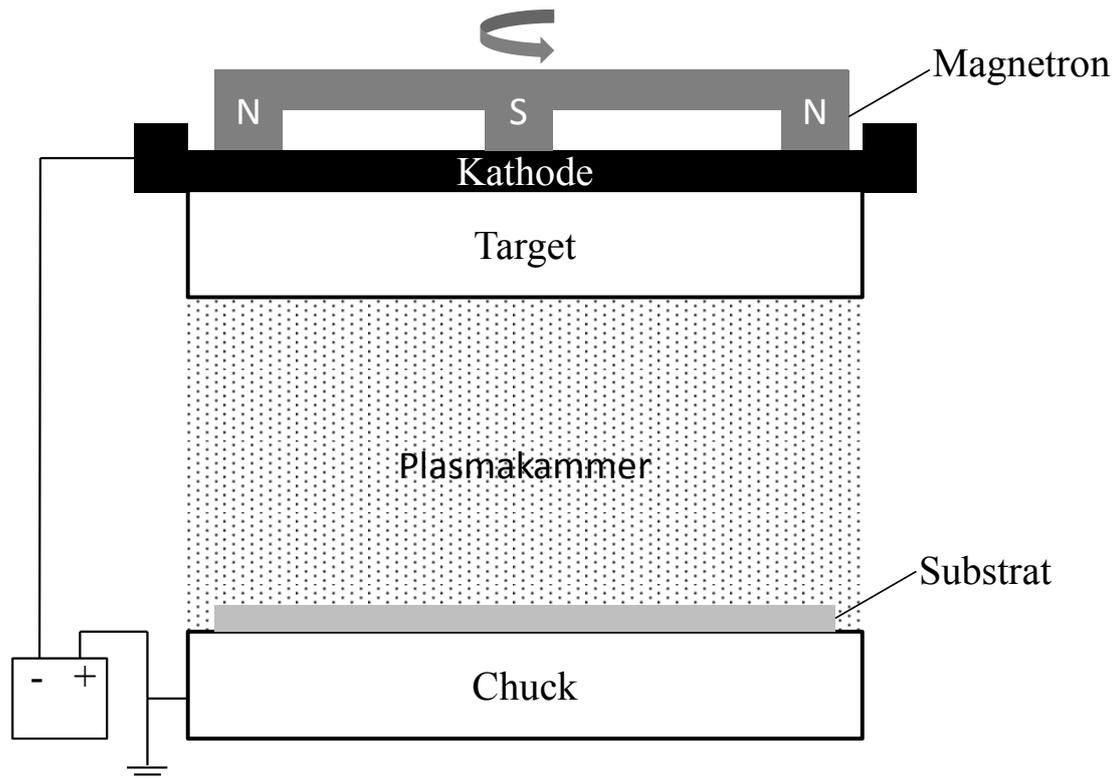


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung einer PVD-Sputterkammer mit Magnetron.

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, eine hochfrequente Spannung (Bias) an den Substratträger anzulegen, welche einen zusätzlichen Beschuss mit Ar-Ionen auf das Substrat ermöglicht. Diese zusätzliche Einstellung bewirkt ein gepulstes Abtragen auf dem Substrat und hat einen positiven Einfluss auf die Kantenabdeckung (Planarisierung) und die Schichtmorphologie [22]. Der Bias wird häufig als Leistung in Watt (W) angegeben, welche die Ausgangsleistung am Biasgenerator beschreibt. Diese Ausgangsleistung ist unabhängig von möglichen Biasspannungsschwankungen am Substrat, welche durch Aufladungseffekte entstehen können.

Die Transportphase beschreibt den Weg der zerstäubten Targetatome zu dem zu beschichtenden Substrat. Durch den Druck im Rezipienten kann die mittlere Energie der auftreffenden Atome eingestellt werden. Bei höheren Drücken im 10^{-2} mbar Bereich verlieren die Teilchen in der Transportphase ihre Energie durch elastische Stöße (Thermalisierung). Bei niedrigen Drücken hingegen bewegen sich die Teilchen nahezu stoßfrei und treffen mit hoher Energie am Substrat auf. Mit dem Druck im Rezipienten und dem bereits erwähnten Bias am Substratträger können der Energieeintrag der Teilchen und folglich die Eigenschaften Verdichtung, Spannungen und Glättung der aufwachsenden Schicht eingestellt werden. Zusätzlich kann ein reaktiver Prozess erfolgen, indem die zerstäubten Teilchen im Plasma mit aktivierenden Komponenten wie Sauerstoff oder Stickstoff reagieren. Über den Partialdruck der reaktiven Gase kann somit die chemische Zusammensetzung der Schicht gesteuert werden [22].

In der letzten Phase, dem Schichtwachstum, werden die Eigenschaften der aufwachsenden Schicht durch die Prozessbedingungen Druck und Bias-Leistung beeinflusst. Zudem spielt die Temperatur des Substrats eine entscheidende Rolle, welche über die kinetische Energie der einfallenden Teilchen, die Kondensationswärme und/oder extern über eine Chuckheizung eingestellt wird [22]. Der Zusammenhang zwischen Prozessdruck und relativer Temperatur (Substrattemperatur zu Schmelztemperatur des Schichtmaterials: T_s/T_m) ist im Strukturzonenmodell nach *Thornton* enthalten, welches in Abbildung 3.2 dargestellt ist [23].

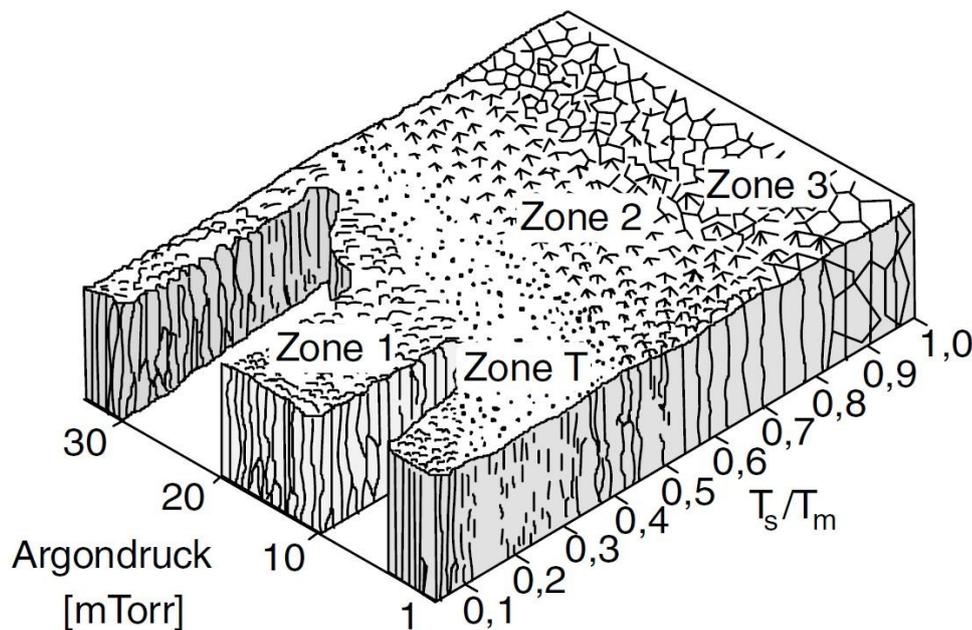


Abbildung 3.2: Strukturzonenmodell nach *Thornton* [23] zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Sputterdruck und homologer Temperatur.

Zone 1 beschreibt hierin eine poröse Schicht mit kleinen Kristallen und geringer Dichte (dendritisch), Zone T ein faserförmiges, dicht gepacktes Gefüge mit glatter Oberfläche, Zone 2 eine Schicht mit kolumnarer Struktur und geringer Oberflächenrauigkeit und Zone 3 eine rekristallisierte Struktur [23]. In den Zonen 1 bis 2 ist die Oberflächendiffusion jeweils der entscheidende Faktor. In Zone 1 findet ein vertikal gerichtetes Wachstum an den Keimstellen statt, da die Oberflächendiffusion temperaturbedingt nicht ausreicht um die Räume zwischen den Dendriten zu überdecken. An den wenigen Keimstellen wachsen nadelförmige Kristalle auf, die mit zunehmender Höhe breiter werden und als Dendriten bezeichnet werden [20]. In Zone 2 und T hingegen kann die Oberflächendiffusion die Zwischenbereiche aufgrund der höheren Temperatur abdecken und in beiden Fällen eine dichter gepackte Struktur mit geringerer Rauigkeit ermöglichen. Zone 2 und T unterscheiden sich vor allem in der Größe der Kristalle und deren Keimstellen. Das Wachstum dieser Kristalle ist allerdings in beiden Fällen vertikal, da die auftreffenden Atome limitiert in deren Richtung sind. Diese Form der Kristalle wird

erst in Zone 3 deutlich verändert. In dieser nächsten Zone wird durch eine zunehmende Volumendiffusion ein rekristallisiertes Gefüge erzeugt. Der Inertgasdruck bewirkt eine Erhöhung der Temperaturen bei Zonenwechsel. Durch Kollision der Metallatome mit den Inertgasatomen wird ein Teil der Energie abgegeben, wodurch weniger Energie zur Oberflächenmigration zu Verfügung steht. Dies wirkt sich ähnlich aus, als ob die Substrattemperatur geringer wäre [20]. Je nach Anwendungsfall und abzuschneidender Schicht können somit die Sputterparameter gewählt und angepasst werden.

3.1.2 Ätzen

Das Strukturieren von Dünnschichten ist eine der Basistechnologien in der Halbleitertechnik. Es existiert eine Vielzahl an Ätzmethoden, welche sich in Anforderungen und Charakteristika voneinander unterscheiden. In diesem Kapitel sollen die Grundlagen zur Strukturierung von metallischen Dünnschichten erläutert werden, wie sie auch im Rahmen dieser Arbeit angewandt wurden. Eine umfassende Übersicht der existierenden Methoden findet sich in den Referenzen [20], [22] und [24]. Das Ätzen von metallischen Dünnschichten lässt sich generell in die beiden Methoden „Nassätzung“ und „Trockenätzung“ unterteilen. Die Nassätzung basiert auf wässrigen oder organischen Lösungen, in denen der Abtrag von Reaktionsprodukten durch Lösungsvorgänge hervorgerufen wird. In Trockenätzverfahren werden gasförmige Radikale und Ionen in Niederdruckplasmen erzeugt, die mit dem zu ätzenden Feststoff zu einem gasförmigen Produkt reagieren [22]. Beide Verfahren haben gemeinsam, dass für eine Oberflächenstrukturierung Teile des Wafers geschützt werden müssen. Diese Schutzschicht wird in den meisten Fällen mit einem lithographisch strukturierbaren Lack (*resist*) realisiert.

In Abbildung 3.3 ist der Unterschied zwischen einer isotropen und anisotropen Ätzung dargestellt. Während bei der isotropen Ätzung die Maskierungsschicht im gleichen Maße unterätzt wie in die Tiefe geätzt wird, werden bei der anisotropen Ätzung Vorzugsrichtungen ausgenutzt. Solche Vorzugsrichtungen können durch Kristallebenen oder durch gerichteten Ionenbeschuss bei Plasmaätzprozessen gegeben sein. Generell sind Nassätzungen von metallischen Schichten isotrop. Plasmaätzungen können je nach Prozesseinstellungen isotrop bis anisotrop sein [20].

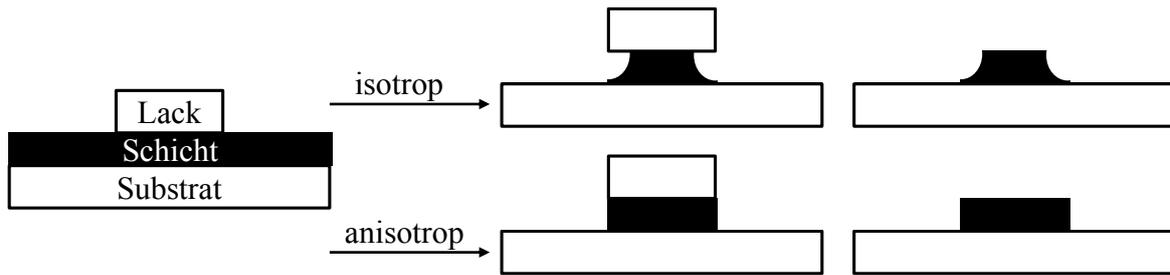


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung einer isotropen vs. anisotropen Ätzung [22].

Nassätzprozesse werden in der Halbleiterfertigung für die Strukturierung im μm -Bereich angewandt. Die Prozessierung findet hauptsächlich in Ätzbecken statt. In diesem Becken können viele Substrate simultan geätzt werden, vorausgesetzt, es wird die gleiche Schicht und Schichtdicke geätzt. Diese Tatsache, in Kombination mit der vergleichsweise wenig komplexen Ausrüstung, macht den Prozess sehr günstig. Das Nassätzen von metallischen Schichten basiert auf elektrochemischen Vorgängen (Reduktions- und Oxidationsprozesse), deren Reaktionsprodukte durch Lösungsvorgängen abgetragen werden. Beim Ätzen von mehreren metallischen Schichten, welche im direkten Kontakt miteinander sind, ist darauf zu achten, dass durch Potentialunterschiede (elektrochemische Spannungsreihe) lokale elektrische Felder entstehen, die unter Umständen eine massive Unterätzung hervorrufen können [22]. Beispiele für Ätzlösungen für Dünnschichten sind in den Literaturstellen [25] und [26] aufgelistet.

Trockenchemische Prozesse sind aufgrund ihrer komplexen Anlagen und der seriellen Prozessierung der Substrate als vergleichsweise teuer einzustufen. Zusätzlich können unter Umständen weitere Reinigungsverfahren nötig werden, um bei der Ätzung entstehende Plasmapolymere zu entfernen. Der Vorteil dieser Methode liegt vor allem in der zum Teil anisotropen Ätzcharakteristik, wodurch deutlich kleinere Strukturbreiten erzeugt werden können. Generell ist die Plasmaätzung in folgende Schritte zu unterteilen [20]:

- Erzeugung der ätzaktiven Gasteilchen
- Transport der Teilchen zum Substrat
- Ätzung der Substratoberfläche
- Abtransport der Ätzprodukte

Die Erzeugung der ätzaktiven Teilchen geschieht durch eine Gasentladung (Plasma) z.B. in einem Parallelplattenreaktor mit Gleich oder Wechselstrom. Der Transport der Teilchen kann gerichtet erfolgen, was einen hohen Einfluss auf die Anisotropie hat. Im Rahmen dieser Arbeit wurde jene Form des Plasmaätzens angewandt, welches sich durch ein chemisches Ätzen mit freien Radikalen und geringer Unterstützung durch Ionen

auszeichnet [20]. Beispiele für typische Ätzelektrolyten und deren ätzbare Schichten sind in der Referenz [24] beschrieben.

3.2 Charakterisierung von Dünnschichten

3.2.1 Schichtstress

Der Schichtstress ist ein wichtiger Parameter zur Charakterisierung von Dünnschichten. Eine Folge von zu hohem Schichtstress kann eine Verbiegung des Substrats sein. Man unterscheidet zwischen thermisch induziertem Stress (σ_t) und intrinsischem Stress (σ_i), welche sich additiv zum Gesamtstress (σ_f) zusammensetzen [27]:

$$\sigma_f = \sigma_t + \sigma_i \quad (3.1)$$

σ_t ist eine Folge von unterschiedlichen Ausdehnungskoeffizienten zwischen z.B. Substrat und der Dünnschicht. σ_i ist abhängig von Materialeigenschaften wie dem Einbau von Prozessgasen [28], Oxidationen, Korngrenzen und -größen [22]. Zur Bestimmung von σ_i wird der Krümmungsradius vor und nach Schichtabscheidung an Siliziumsubstraten gemessen. Über die *Stoney*-Gleichung kann σ_f ermittelt werden [29]:

$$\sigma_f t_f = \frac{E_s h^2}{6(1 - \nu_s)R} \quad (3.2)$$

Hierbei ist t_f die Dicke der zu bestimmenden Dünnschicht, E_s das Elastizitätsmodul des Substrats, h die Dicke des Substrats, ν_s die *Poisson*-Zahl des Substrats und R der gemessene Biegeradius. Die Berücksichtigung des Initialwerts des Biegeradius (R_0) führt zu [12]:

$$\sigma_f = \frac{E_s h^2}{6(1 - \nu_s)t_f} \cdot \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right) \quad (3.3)$$

Über das Vorzeichen des Stresswerts kann ermittelt werden, ob es sich um kompressiven oder tensilen Stress handelt. Negative Werte repräsentieren kompressiven und positive Werte einen tensilen Schichtstress. Typische Werte für Metallisierungen und Barrierenschichten bewegen sich im Bereich von 10^6 - 10^9 Pa, wobei sowohl die kompressive als auch tensile Richtung, abhängig vom verwendeten Material, möglich ist. Zur Messung des Krümmungsradius werden z.B. Oberflächenprofilometer oder kapazitive Messverfahren verwendet. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die kapazitive Methode genutzt (Kapitel 5.3).

3.2.2 Stöchiometrie

Die Messung der elementaren Schichtzusammensetzung (Stöchiometrie) ist bei Dünnschichten, welche aus mehr als einem Element bestehen, eine notwendige Analysemethode. Ein etabliertes Mittel zur Bestimmung der Konzentration ist die Röntgenfluoreszenzspektroskopie (RFS), auch bekannt als Röntgenfluoreszenzanalyse (RFA). Die Analyse basiert auf dem Messen von Wellenlänge oder Energie der charakteristischen Röntgenstrahlung von Atomen [12]. Die Anregung wird über Röntgenstrahlung realisiert, wobei kernnahe Elektronen herausgeschlagen und durch Elektronen aus energetisch höheren Orbitalen ersetzt werden. Die dabei frei werdende Energie wird in Form einer charakteristischen Röntgenstrahlung abgegeben und ist repräsentativ für das jeweilige Element [20].

3.2.3 Rasterelektronenmikroskopie

Das Rasterelektronenmikroskop (REM) ist wohl das meist genutzte analytische Messgerät zur Aufsicht und Vermessung von Strukturen, Schichten und Gefügen im Submikrometerbereich. Der schematische Aufbau des Geräts ist in Abbildung 3.4 gezeigt.

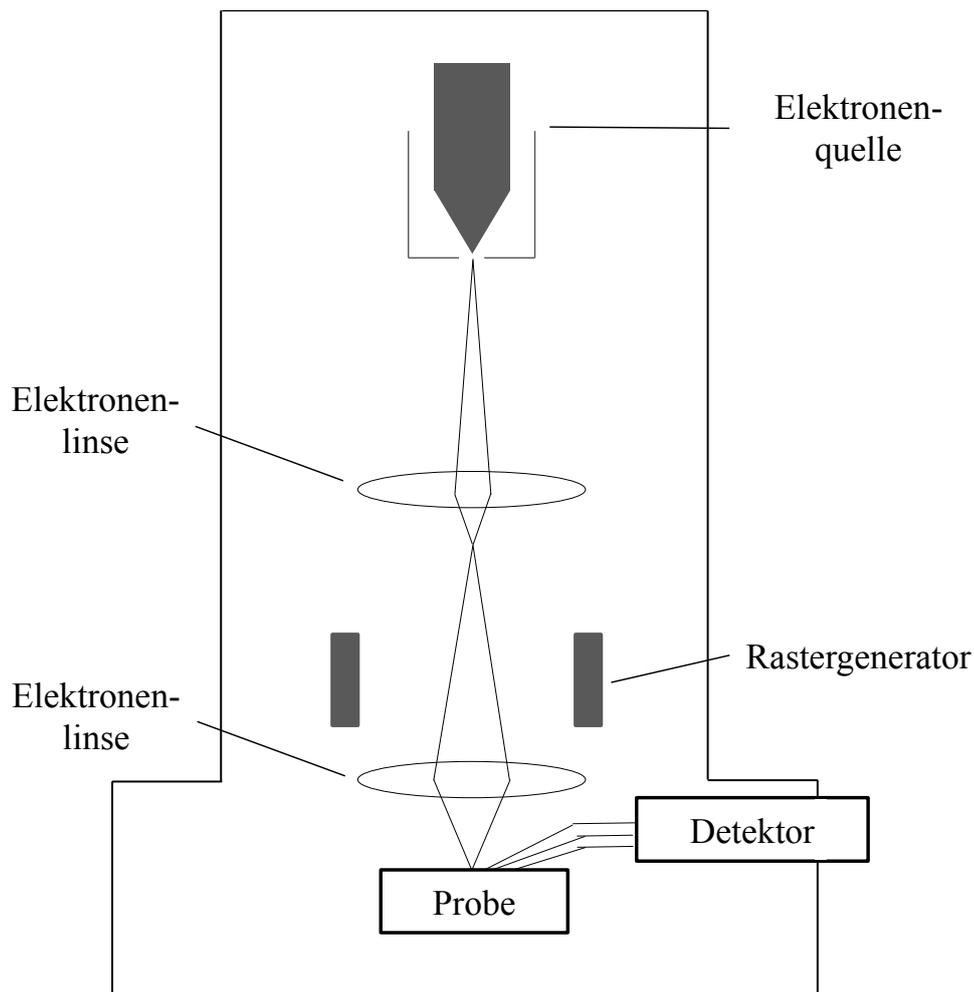


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung eines Rasterelektronenmikroskops [30].

Prinzipiell besteht ein REM aus einer Elektronenquelle, einem Linsensystem für Elektronen, einem Rastergenerator und einem Sekundärelektronendetektor, welcher an eine Bildverarbeitung angeschlossen ist. Die Elektronen werden in der Quelle, meist einem dünnen (100 μm) Wolframfilament, durch Aufheizen (ca. 2800 K) erzeugt und durch Anlegen einer positiven Spannung an der Anode (1 - 30 kV) beschleunigt. Diese Form der Elektronenerzeugung ist am gebräuchlichsten, es sei jedoch an dieser Stelle erwähnt, dass auch andere Quellen, wie z.B. eine Feldemissionskathode oder ein *Schottky*-Kathode in einigen Geräten verbaut sind [30]. Die Bildgebung basiert auf unterschiedlichen Emissionssignalen, resultierend aus elektrostatischen Wechselwirkungen von Primärelektronen und der Probe. Sowohl die Detektion der Sekundärelektronen (SE-Signal, inelastisch), als auch die Detektion der rückgestreuten Elektronen (BSE-Signal, elastisch) ist möglich und wird häufig angewandt [31]. Durch Neigung der Probe kann das Sekundärelektronensignal zudem erhöht werden. Die Detektion von rückgestreuten Elektronen kann zusätzliche Informationen enthalten, da im Gegensatz zum Sekundärelektronendetektor Regionen hoher Dichte und/oder hoher Atommasse hell erscheinen [12]. Die Bildgebung wird bei allen Arten der Detektionen durch das Rastern des Elektronenstrahls über die Probe realisiert. Die Anfertigung von Schliffbildern (cross sectioning) ist eine häufig angewandte Methode um Oberflächen- durch Tiefenanalysen zu erweitern. Dabei ist sowohl die Präparation von Brüchen, als auch von eingebetteten und polierten Proben möglich. Heute verwendete REMs beinhalten zusätzlich noch analytische Funktionen, wie z.B. einen Detektor für die energiedispersive Röntgenspektroskopie (EDX). Ähnlich wie beim RFA wird hierbei eine charakteristische Röntgenstrahlung detektiert, die infolge des Herausschlagens eines kernnahen Elektrons und dem simultanen Auffüllen aus einem energetisch höheren Orbital entsteht. Anders als beim RFA wird die Anregung über den Elektronenstrahl realisiert. Elemente ab einer Ordnungszahl > 11 können mit dieser Methode nachgewiesen werden [32].

3.2.4 Focused Ion Beam Mikroskopie

Der Aufbau eines Focused Ion Beam Mikroskops (FIB) ähnelt dem eines REMs. Als Quelle dient dem FIB-Mikroskop jedoch meist eine Gallium-Quelle (Ga). Ga-Atome werden verdampft, ionisiert und mit circa 0,5 - 30 keV beschleunigt und über ein Linsensystem auf die Probe fokussiert. Die Bildgebung wird über die Wechselwirkung der Ionen mit dem Probenmaterial beeinflusst und unterscheidet sich von der eines REMs. Sowohl Sekundärionen als auch Sekundärelektronen können detektiert werden. Bei polykristallinen Materialien wird die Bildgebung durch den sogenannten „channeling“-Effekt der Ionen unterstützt. Hierbei entsteht, abhängig von der Kristallorientierung der Körner, ein Kontrast, welcher durch die unterschiedliche Eindringtiefe in den Kristall erzeugt wird [33]. Das FIB-Mikroskop kann ergänzend zum Materialabtragen genutzt

werden. Die hochenergetischen Ga^+ -Ionen lassen einen vertikalen Abtrag zu, welcher zu einer Tiefenanalyse genutzt werden kann. Die Betrachtung und Analyse des durch den Abtrag entstandenen Querschliffs (*cross section*) kann bei Verwendung eines Dual-Beam-FIB (*dual-beam* = REM & FIB) auch mit einem REM/EDX geschehen. Neben den bildgebenden Verfahren können weitere Präparationstechniken (Ätzung, Abscheidung) erfolgen, die hier nicht weiter erläutert werden (siehe u.a. unter [34]).

3.2.5 Transmissionselektronenmikroskopie

Das Transmissionselektronenmikroskop (TEM) ist zur Analyse von Schichten und deren Mikrostrukturen ein wichtiges Utensil. Das TEM verwendet einen hochenergetischen Elektronenstrahl (80 - 400 keV), der auf eine sehr dünn vorbereitete Probe auftrifft und durchstrahlt. Die Elektronen werden abhängig von den kristallographischen Parametern und der Wellenlänge der Elektronen am Kristallgitter gebeugt. Die Bildgebung basiert auf in unterschiedliche Richtung gebeugte Elektronen, die beim Durchgang durch die Probe entstehen. Der Beugungswinkel ist dabei abhängig von den kristallographischen Parametern der Probe. Der Kontrast entsteht aufgrund von Phasenunterschieden im Gefüge und nicht von Materialunterschieden. Das Ergebnis sind sowohl Bilder, die Aufschluss über die Gefügezusammensetzung eines Bereichs geben, als auch Röntgenbeugungsbilder, die Informationen über die mikrostrukturellen und chemischen Eigenschaften beinhalten [33]. Der Unterschied der Bildgebung im Vergleich zum SEM/FIB ist in Abbildung 3.5 gezeigt. Während sich in der hinteren Brennebene der Objektivlinse alle Elektronen treffen, welche die Probe im gleichen Winkel verlassen haben und das Beugungsbild ergeben, werden in der Bildebene alle jenen Elektronen fokussiert, die vom gleichen Ort der Probe stammen. Die Methode dieser Mikroskopie verlangt eine komplexe und exakt ausgeführte Probenvorbereitung [12]. Wie erwähnt werden sehr dünne Proben analysiert. Der erste Schritt einer Probenvorbereitung ist die Herstellung einer Lamelle, die im FIB freigeschnitten und in situ auf einen Träger transferiert und befestigt wird. Diese Probe wird daraufhin zusätzlich im System über einen Ionenstrahl (meist Ga^+) gedünnt. Dieser Dünnungsprozess geschieht erst grob mit Beschleunigungsspannungen um 30 kV und danach fein bei Spannungen um 2 - 5 kV. So entstehen Proben mit einer Dicke von < 40 nm [33]. Eine weitere Möglichkeit des zusätzlichen Dünnens besteht im Beschuss mit Ar^+ -Ionen, dem sogenannten Ionendünnen oder auch *Ar-milling*. An den Rändern des dadurch entstandenen Lochs ist die Probe sehr dünn, sodass wenige Kristallüberlagerungen stattfinden. So können auch Lamellen mit einer partiellen Dicke von < 10 nm analysiert werden, die eine genaue Darstellung der Kristallstruktur zulassen. Die Auflösung steigt somit auf circa 0,1 nm [12].

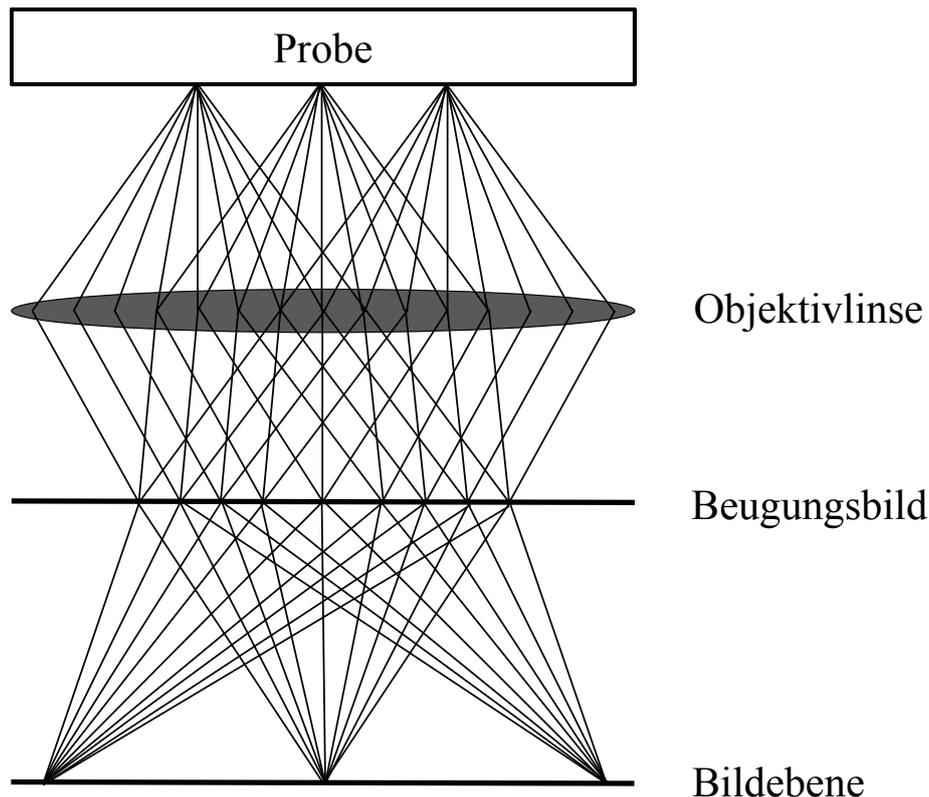


Abbildung 3.5: Schematische Darstellung des Strahlenganges an der Objektivlinse eines TEM-Mikroskops [33].

Ein TEM kann auch als Rastertransmissionselektronenmikroskop (RTEM) benutzt werden. Ähnlich wie beim REM wird ein fein fokussierter Elektronenstrahl von einem Rastergenerator über die Probe geführt. Dabei werden die Beugungsbilder auf unterschiedliche Detektoren abgebildet. Je kleiner der abgerasterte Bereich, desto höher ist die Vergrößerung und vice versa. Bei Detektoren sind Hellfelddetektoren (BF = *bright field*) und kreisförmige Dunkelfelddetektoren (HAADF = *high angle annular dark field*) am gebräuchlichsten. BF-Detektoren werden vorwiegend für die Detektion von in kleinen Winkeln gestreuten Elektronen und der HAADF-Detektor für weitwinklig gestreute Elektronen benutzt [33].

3.2.6 Röntgendiffraktometrie

Röntgendiffraktometrie (XRD, *X-Ray diffraction*) ist eine Charakterisierungsmethode für kristalline Werkstoffe. Diese Methode basiert auf der Streuung und Interferenz von Röntgenstrahlen an einem Kristallgitter. Mit einem Detektor wird die Intensität der gestreuten Strahlung gemessen. Reflexe (Intensitätsmaxima) an bestimmten Winkeln zwischen einfallendem Strahl (2θ) und Detektionsrichtung sind maßgeblich für die geometrische Struktur des Kristalls. Der Winkel ist abhängig vom Verhältnis zwischen der Wellenlänge der Strahlung (λ) und dem Abstand zwischen den Atomlagen, respektive den Netzebenen (d). Da der Reflex den Winkel angibt und die Wellenlänge der Strahlung

bekannt ist, können der Atomlagenabstand und die geometrische Struktur bestimmt werden [33]. In Abbildung 3.6 ist die Streuung an zwei Netzebenen schematisch dargestellt.

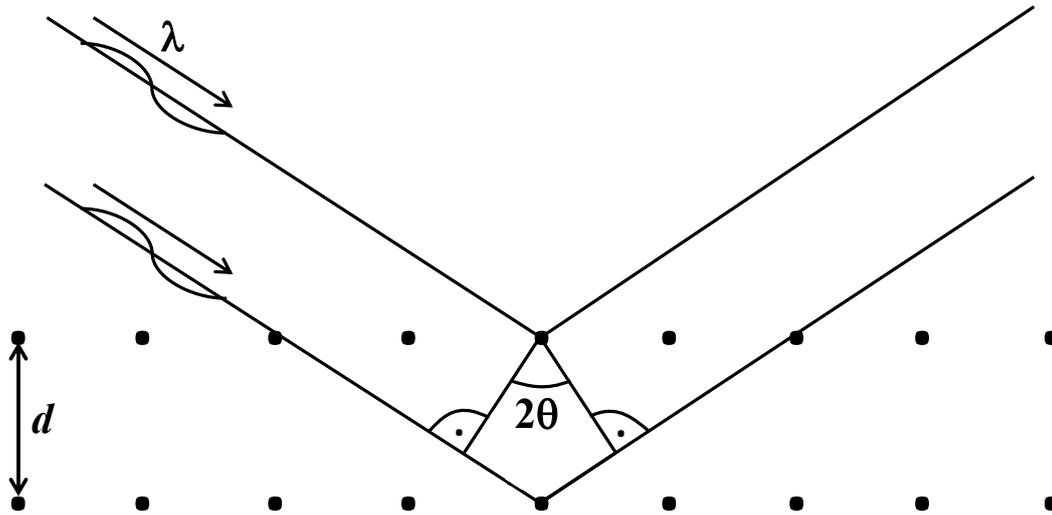


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Streuung von Röntgenstrahlung an zwei Netzebenen einer kristallinen Substanz [33].

Als Ergebnis werden Beugungsspektren geliefert, deren Linien den Gitterebenen des Kristalls zugeordnet werden können. Die Breite der Reflexe und die relativen Intensitäten geben eine Aussage über das Maß an Kristallinität und die Ausrichtung der Kristalle [22].

Zusätzlich kann anhand der Beugungsspektren die Kristallgröße berechnet werden. Die Kristallitgröße steht in direktem Zusammenhang mit der Breite des Intensitätsmaximums und kann auf Basis der *Scherrer*-Gleichung abgeschätzt werden [35].

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos \theta_B} \quad (3.4)$$

In Gleichung (3.4) ist der Zusammenhang aus der Kristallitgröße D , dem Korrekturfaktor K , der Wellenlänge der Strahlung λ , der Halbwertsbreite β (in rad) und dem Winkel θ_B des reflektierten Röntgenstrahls dargestellt.

3.2.7 Photoelektronenspektroskopie

Die Photoelektronenspektroskopie (PES) dient hauptsächlich zur Oberflächenanalytik, es kann jedoch auch die Tiefenzusammensetzung bei zusätzlichem Abtrag in die Tiefe ermittelt werden. Die Analysemethode beruht auf dem photoelektrischen Effekt. Durch Absorption von Photonen werden aus Atomen und Molekülen Photoelektronen emittiert,

deren kinetische Energie (E_{kin}) bestimmt wird [33]. Die Anregung der Elektronen wird entweder über Röntgenstrahlung (XPS, *X-Ray photoelectron spectroscopy*) oder UV-Licht (UPS, *ultraviolet photoelectron spectroscopy*) getätigt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Methode XPS genutzt. Zur Anregung wird beispielsweise eine Al- K_{α} -Strahlung mit einer Photonenenergie von $h\nu = 1486$ eV benutzt. Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass zusätzlich zur reinen Elementzusammensetzung auch eine Aussage über den chemischen Bindungszustand getroffen werden kann [20]. Der Zusammenhang zwischen Bindungsenergie (E_B), Photonenenergie ($h\nu$) und detektierter kinetischer Energie (E_{kin}) ist in Gleichung (3.5) angegeben. Mit der bekannten Differenz der Austrittsarbeit zwischen Probe und Spektrometer kann E_B ermittelt werden [12], welche charakteristisch für die jeweilige Verbindung ist.

$$E_{kin} = h\nu - E_B - \Delta\phi \quad (3.5)$$

Als Ergebnis wird die Anzahl der detektierten Elektronen in Abhängigkeit zu E_B dargestellt. Aus diesen Spektren kann die Information über Atomkonzentrationen und chemische Bindungen getroffen werden. Die Auflösungsgrenze dieses Verfahrens liegt bei circa 0,1 At.-%.

3.2.8 Auger-Elektronenspektroskopie

Wie die PES ist auch die *Auger*-Elektronenspektroskopie eine oberflächensensitive Methodik. Ähnlich wie bei XPS werden Elektronen in Abhängigkeit von einer charakteristischen Energie gemessen. Der Effekt beruht darauf, dass *Auger*-Elektronen beim Auffüllen von inneren Elektronenschalen auftreten. Wird ein Elektron aus einer inneren Atomschale herausgeschlagen, kann ein Elektron aus einer äußeren Schale diese auffüllen und ein Photoelektron aussenden. Dieses Photon kann von einem weiteren Elektron aus einer äußeren Schale absorbiert werden, welches dann genug Energie gewinnt um das Atom als *Auger*-Elektron zu verlassen. Dieses Elektron ist charakteristisch für ein Element. Es können alle Elemente außer Wasserstoff und Helium detektiert werden [20]. Wie bei der PES ist mithilfe einer Sputterquelle auch eine Elementanalyse in die Tiefe möglich. Eine weitere Möglichkeit besteht im „*element mapping*“. Als Quelle dient ein fein fokussierter Elektronenstrahl, der die Oberfläche abrästert und somit ein Elementverteilungsbild im Nanometerbereich liefert. Die Nachweisgrenzen liegen bei circa $\geq 0,1$ At.-% [33].

3.2.9 Sekundärionen-Massenspektrometrie

Um Diffusion in Dünnschichten bei beschleunigter Alterung zu untersuchen wurde die Analysemethode SIMS (*secondary ion mass spectrometry*) angewandt. Diese spektroskopische Methode zeichnet sich durch folgende Eigenschaften aus:

- Eindeutiger Nachweis und Quantifizieren von Elementen und Molekülen
- Möglichkeit zur Messung eines Tiefenprofils (bei dynamischen Messmodus)
- Laterale Auflösung möglich (*mapping*)
- Sehr hohe Nachweisgrenze (ppm-Bereich)
- Analyse von leitenden und nichtleitenden Materialien

Aufgrund dieser positiven Eigenschaften wurde SIMS für die Untersuchung der Diffusionsbarrieren in dieser Arbeit oft verwendet. Die Möglichkeit der Herstellung eines Tiefenprofils und die hohen Quantifizierungsgrenzen ermöglichen das Charakterisieren von mikrostrukturellen Veränderungen nach Temperaturbelastungen ohne zusätzliche Probenvorbereitung bzw. Probenveränderung. Im Folgenden soll kurz die prinzipielle Funktion dieser Methode und deren Anwendungsmöglichkeit gezeigt werden, eine komplette Übersicht findet sich in den Referenzen [36] und [37]. Die Methode basiert auf der Analyse von Sekundärionen aufgrund des Beschusses der Probe mit Primärteilchen (Ionen oder neutralen Teilchen). In Abbildung 3.7 ist ein SIMS-Messgerät schematisch dargestellt. Primäre Ionen werden in der Quelle generiert und auf die Probenoberfläche beschleunigt. Dort führen sie zu atomaren Kollisionen mit den Oberflächenatomen der Probe und eine sogenannte Kollisionskaskade ist die Folge. Ein Teil der Energie wird wieder zurück an die Oberfläche transportiert, was dazu führt, dass einige Moleküle und Atome an der Oberfläche ihre Bindungsenergie überwinden. Diese Generation der Sekundärteilchen ist so sanft, dass auch Atomverbände mit hoher Masse nicht oder nur sehr wenig gestört werden. Typische primäre Ionenquellen sind Ar^+ bzw. O_2^+ oder Clusterionen wie $\text{Bi}_{1-7}^{+(+)}$ und Ga^+ aus einer sogenannten *liquid metal ion gun* (LMIG). Zum größten Teil werden Neutralteilchen generiert, aber es entstehen auch geladene Sekundärionen, sowohl in positiver als auch in negativer Polarität. Diese Sekundärionen werden mit Hilfe eines Detektors eindeutig ihrem Element zugeordnet. Diese Zuordnung kann mit Hilfe verschiedener Detektoren geschehen. Im Rahmen dieser Arbeit wurden Messgeräte mit einem Flugzeitmassenanalysator (ToF, *time of flight*) und einem Quadrupol-Massenanalysator genutzt. Beim ToF-Analysator geschieht der Identifizierung anhand der Flugzeit in einer Vakuumröhre, was eindeutig ihrer Masse respektive dem Element/Molekül zuzuordnen ist. Der Quadrupol-Analysator kann die einfallenden Sekundärionen anhand ihrer Masse zuordnen. Die Elemente müssen aber vorher bekannt sein, da im Vorhinein nur für diese Elemente der Weg durch das elektrische Feld im Quadrupol geöffnet wird. Sowohl im Flugzeitanalysator als auch im Quadrupol-Analysator

wird das Ergebnis anhand eines Spektrums sichtbar. In Abbildung 3.7.b ist zusätzlich noch eine Sputterquelle eingezeichnet. Bei allen Analysen in dieser Arbeit wurden Tiefenprofile erstellt. Für eine solche dynamische SIMS-Messung ist eine Sputterquelle nötig, die den Massenabtrag realisiert und zusätzlich mit einer zweiten Quelle die Sekundärionen über den Beschuss mit Ionen generiert. Typische Sputterelemente sind O_2^+ , Cs^+ oder SF_5^+ . Die ebenfalls in der Abbildung 3.7.b sichtbare *Floodgun* ist für die Messung von nicht leitfähigen Proben nötig, da mit ihr Aufladungseffekte durch einen konstanten Elektronenfluss verhindert werden können.

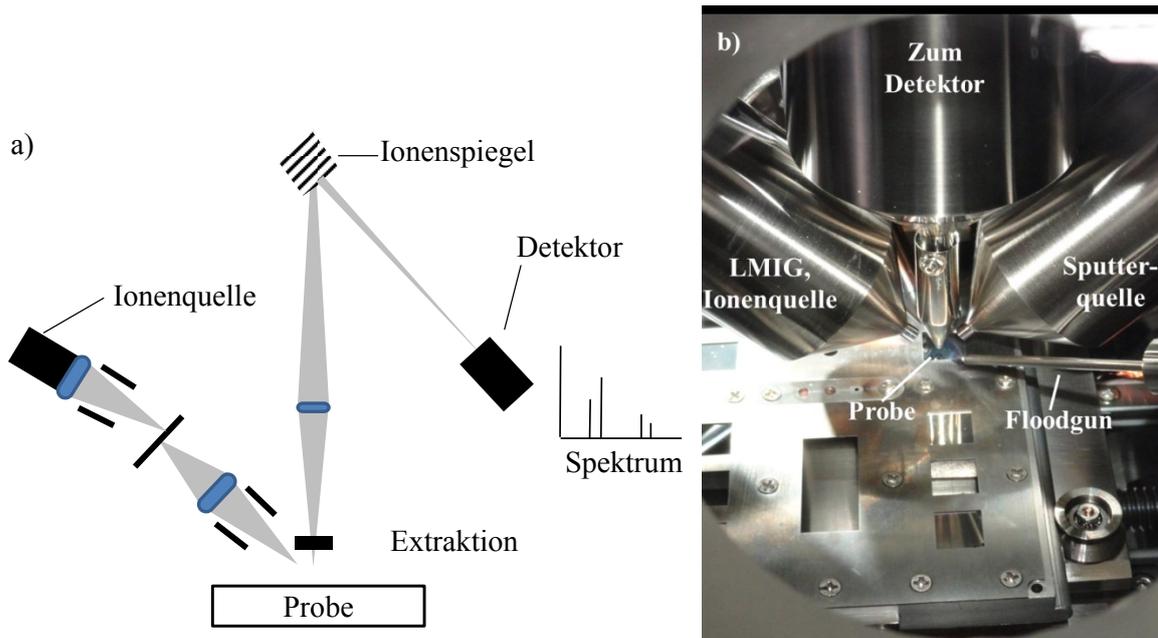


Abbildung 3.7: a) Schematische Darstellung eines ToF-SIMS-Messgeräts von der Primärionenquelle bis zur Spektrengenerierung [38], b) reale Aufnahme während der Spektrengenerierung in einen ToF-SIMS Messgerät.

Bei der Verwendung einer Sputterquelle zur Erzeugung von Tiefenprofilen werden, wie bereits erwähnt, zwei separate Ionenstrahlen auf die Probe gerichtet. Während der Analysestrahl angeschaltet ist und die Extraktion der Sekundärionen geschieht, ist der Sputterstrahl ausgeschaltet. Anschließend werden die Extraktion und der Primärionenstrahl aus- und der Sputterstrahl eingeschaltet, was einen lateralen Abtrag bedeutet. Nach dem Abtrag finden erneut ein Beschuss mit Primärionen und eine Extraktion von Sekundärionen statt. Durch die Wiederholung dieser Prozesse wird ein Tiefenprofil erzeugt. Da der vom Sputtern entstandene Krater konisch zuläuft, ist die Fläche des Sputterrasters größer als die des zu analysierenden Bereichs. In Abbildung 3.8 ist dieser Zusammenhang anhand einer analysierten Probe aus Kapitel 5.5.4 gezeigt. Die analysierte Fläche beträgt hierbei circa 6% der gesputterten Fläche bei einer analysierten Tiefe von $1,5\ \mu\text{m}$.

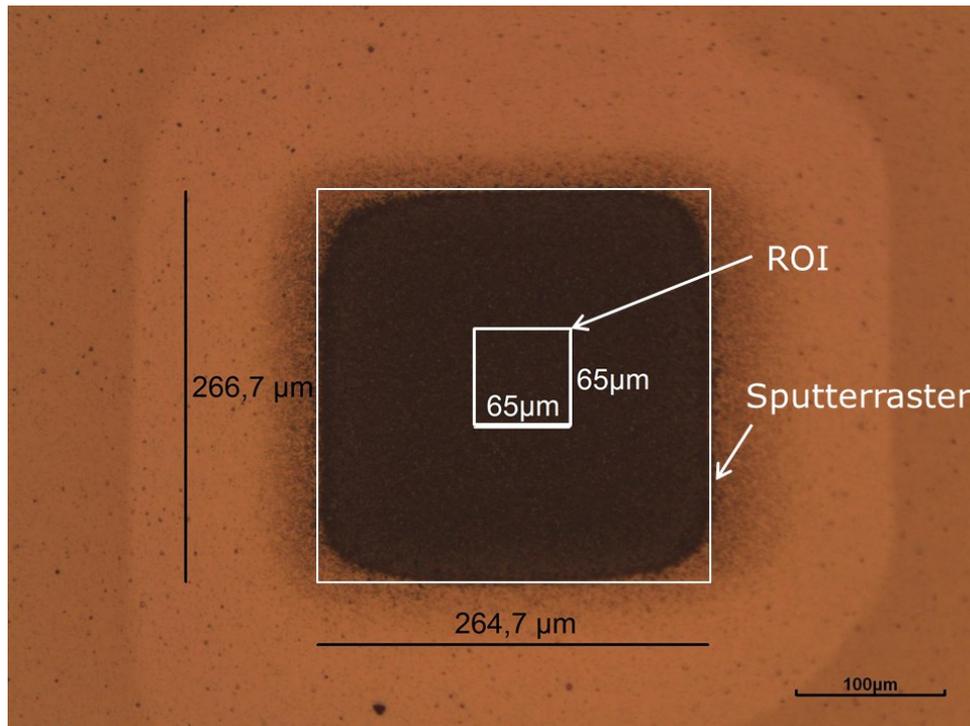


Abbildung 3.8: Zusammenhang zwischen Sputterraster und Analysebereich (ROI, *region of interest*) anhand eines Sputterkraters an einer Barrierentestscheibe nach ToF-SIMS Analyse.

3.2.10 Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzspektroskopie

Die Totalreflexions-Röntgenfluoreszenzanalyse (TXRF, *total reflection x-ray fluorescence*) wurde im Rahmen dieser Arbeit zum Diffusionsnachweis in Festkörpern hergenommen. Dies war nur möglich, da eine Fremdstoffdiffusion bis zur Aluminiumoberfläche stattfand. TXRF ist eine oberflächensensitive Analyse mit einer Analysentiefe von nur wenigen nm und gleicht dem RFA bis auf die Geometrie des Messaufbaus. Eine verbesserte Auflösung wird dadurch erzielt, dass der Röntgenstrahl in einem sehr flachen Winkel eingestrahlt wird und es zu dessen Reflexion an der Probenoberfläche kommt. Die Reflexion wiederum führt dazu, dass das Rauschen aus der Probe im Vergleich zu dem Signal sehr gering ist und die Nachweisgrenze bis auf wenige ppm erhöht wird [39] [40].

3.2.11 Schichtwiderstand

Die elektrische Leitfähigkeit σ , respektive deren Kehrwert der spezifische elektrische Widerstand ρ , einer Schicht kann über den Flächenwiderstand R_{\square} hergestellt werden. Der Flächenwiderstand ist der Widerstand einer quadratischen Schicht. R_{\square} wird über folgenden Zusammenhang beschrieben [22], wobei d die Schichtdicke der zu bestimmenden Schicht ist:

$$R_{\square} = \frac{1}{\sigma \cdot d} \quad \text{und} \quad \rho = \frac{1}{\sigma} \quad (3.6)$$

Die Messung von R_{\square} wird meist mittels der Vierpunktmethode durchgeführt und wird von *Maissel* et al. genau beschrieben [41]. Vier Elektroden werden in gleichem Abstand (lineare Anordnung) oder an den Ecken eines Quadrats (quadratische Anordnung) mit Nadeln auf der Schicht kontaktiert. Über einen eingepprägten Strom I an den Randlektroden (lineare Anordnung) oder an benachbarten Elektroden (quadratische Anordnung) wird ein Spannungsabfall U zwischen den inneren bzw. den gegenüberliegenden Elektroden gemessen. Für den Flächenwiderstand gilt:

$$R_{\square} = 4,532 \cdot \frac{U}{I} \quad (\text{lineare Anordnung})$$

$$R_{\square} = 9,06 \cdot \frac{U}{I} \quad (\text{quadratische Anordnung}) \quad (3.7)$$

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein automatisiertes Messgerät mit quadratischem Messmodus angewendet. Es konnte zudem die Verteilung des Schichtwiderstandes über den beschichteten Wafer mit 9 Messpunkten bestimmt werden. Der spezifische Widerstand ist abhängig von Defekten. So besitzen Schichten mit hohen Gitterverzerrungen durch Korngrenzen, Versetzungen oder Leerstellen erhöhte Widerstandswerte [42].

3.2.12 Kontaktwiderstand zu Si

Der Kontaktwiderstand (R_c) ist jener Widerstand, der am Übergang vom Halbleiter zum Kontaktmaterial, welches in den meisten Fällen Metall ist, auftritt. In Abbildung 3.9 ist die Abhängigkeit zwischen spezifischem Kontaktwiderstand und der Art und Höhe der Grundmaterialdotierung aufgezeigt. Es ist eindeutig erkennbar, dass eine Erhöhung der Dotierkonzentration ein Herabsetzen des Kontaktwiderstands mit sich zieht. Bei hohen Dotierkonzentrationen (C_s) überwiegt der Effekt der Feldemission (*tunneling*) [43] [44]. Bei geringeren Konzentrationen wird der Kontaktwiderstand hauptsächlich über thermische Anregung bestimmt und erreicht sehr hohe Werte [44]. Des Weiteren ist der Kontaktwiderstand abhängig vom verwendeten Metall. In Abbildung 3.9 ist beispielsweise Al als Kontaktmaterial gezeigt. Al als Element der dritten Hauptgruppe des Periodensystems besitzt an sich eine p-dotierende Wirkung und verbessert den Kontaktwiderstand auf p erheblich. Zur Messung der spezifischen Kontaktwiderstände werden typischerweise allgemeingültige Strukturen angewandt, wie z.B. die *Berger*- oder die TLM-Teststruktur (*transmission line measurement*). Eine detaillierte Beschreibung dieser Strukturen ist in den Referenzen [45] [46] und [47] gezeigt.

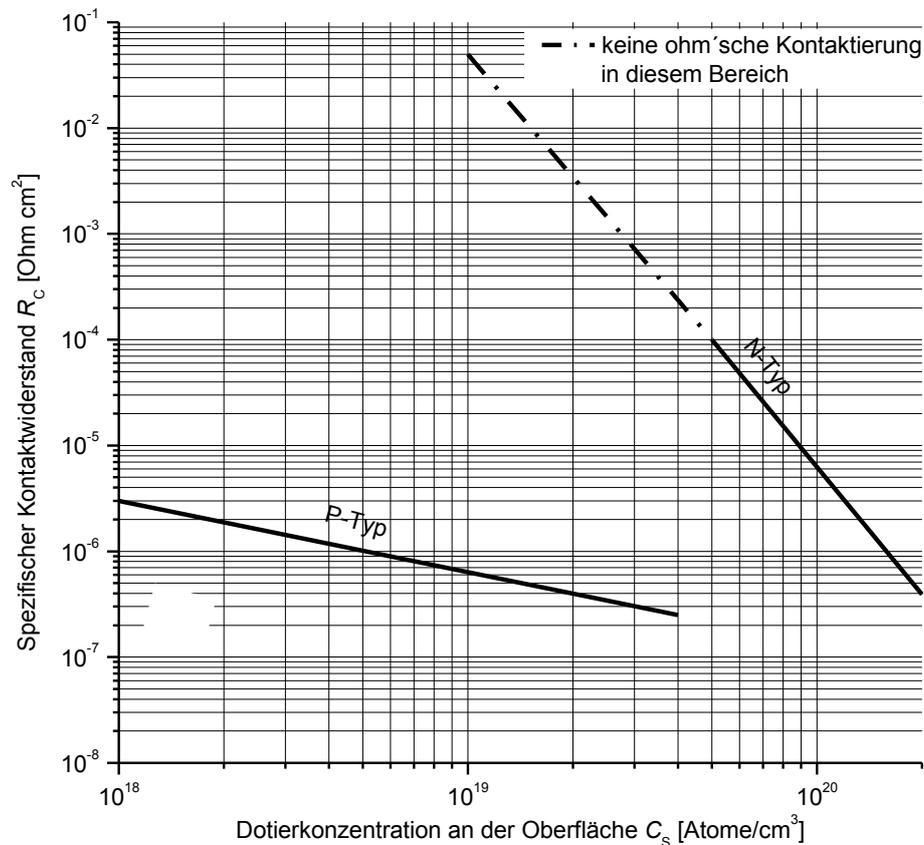


Abbildung 3.9: Spezifischer Kontaktwiderstand R_c von Al zu p- und n-dotiertem, einkristallinen Si [48].

Grundsätzlich werden Widerstände an strukturierten Metall/Silizium-Kontakten in definierten Abständen gemessen. Durch die Messung an mehreren Strukturen in definierten Abständen wird der Einfluss des Si-Substrats (dotiert) eliminiert und ein spezifischer Widerstand ermittelt. Bei der Messung nur einer Struktur kann der Kontaktwiderstand abhängig von der Leitfähigkeit des Substrats bestimmt werden, der ein relatives Vergleichen mit weiteren Metallisierungen ermöglicht, vorausgesetzt die Leitfähigkeit des Substrats ist identisch. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Kontaktwiderstand auf den Demonstratoren zu identisch dotierten Si gemessen, sodass die Widerstandswerte relativ untereinander verglichen werden konnten. Die Widerstandsermittlung wurde bei einem eingepprägten Strom von 1 mA bestimmt. Um den Kontaktwiderstand zu reduzieren und ohmsche Kontakte zu ermöglichen, können Silizide eingesetzt werden. Abhängig von ihrer Energiedifferenz zum Leitungs- oder Valenzband können die Kontaktwiderstände verringert werden [12] [49].

4 Werkstoffe für Diffusionsbarrieren

4.1 Diffusionsstabilität

Dünnschichten als Barrierenmaterial müssen in erster Instanz stabil gegenüber der Diffusion von Si und Al sein, um die Bildung von Al-Spikes zu verhindern. Grundsätzlich ist eine Diffusion über Grenzflächen deutlich stärker als über das Volumen von Kristallen, da diese Grenzflächen Störungen des idealen Kristalls mit verminderter Bindungsenergie darstellen. *Bargel* und *Schulze* zeigen, dass die Diffusion über Korn- bzw. Phasengrenzen, insbesondere über Oberflächen, um zwei bis drei Größenordnungen höher ist, als über das Volumen von Kristallen [1]. Da die Barriere als Schicht zwischen Al und Si liegt, kann Oberflächendiffusion ausgeschlossen werden. Um eine Diffusion über Korngrenzen zu erschweren, sollte eine Barriere im Idealfall amorph [50] oder nano- bis feinkristallin sein [51]. Vorhandene Korngrenzen sind idealerweise möglichst klein, erstrecken sich nicht über die gesamte Schichtdicke und öffnen somit keine potentiellen Diffusionspfade. Zusätzlich haben die Korngrenzdicken auch einen Einfluss auf die Diffusion über Korngrenzen [52]. Je größer die Korngrenze ist, desto stärker ist auch die Störung des kristallinen Systems. In Abbildung 4.1 ist ein potentieller Diffusionsweg eines Fremdstoffes über Korngrenzen in Abhängigkeit der Korngröße dargestellt. Sind sehr große Körner, ähnlich der Schichtdicke, vorhanden, so erfolgt der Diffusionsweg über nur wenige Korngrenzen. Liegt aber eine feinkristalline Schicht vor, deren Körner sehr viel kleiner sind als die Schichtdicke selbst, so müssen viele Korngrenzen überwunden werden bevor die Diffusion durch die Schicht vollzogen ist. Die damit verbundene Vergrößerung der Oberfläche bewirkt auch ein höheres Wechselwirkungspotential mit dem diffundierenden Stoff. Weiterhin besitzen große Körner im Vergleich zu kleinen größere Korngrenzdicken, welche eine Diffusion erleichtern.

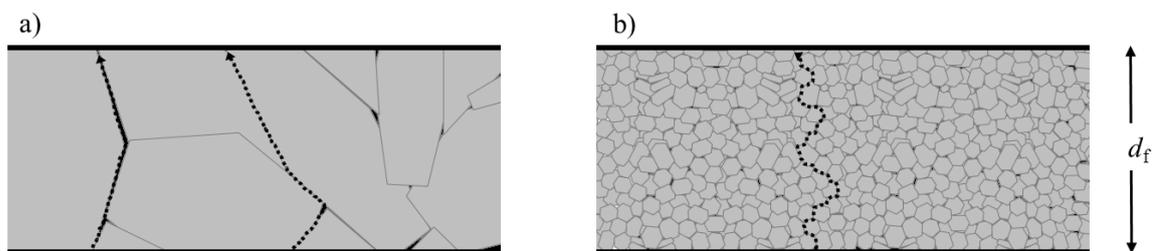


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Diffusionswegs über a) große Körner und b) kleine Körner verglichen mit der Schichtdicke d_f .

Metallische und leitende Dünnschichten mit amorpher Struktur können bisher praktisch nur im CVD-Verfahren¹ hergestellt werden, welches sich aber durch diverse Nachteile wie z.B. Substratanätzungen beim Abscheidungsprozess oder geringer Haftung von Folgeschichten kennzeichnet [50]. Der Nachteil der schlechten Haftung von Folgeschichten, wie z.B. der Endmetallisierung, ist für Leistungshalbleiter nicht zu tolerieren. Auf Modulebene müssen Leistungshalbleiter auf elektrisch aktiver Fläche mit Drahtdurchmessern bis zu 400 µm und hohen Ultraschalleistungen und Bonddrahtverformungen bondbar sein, um eine hohe Anzahl an Lastwechseln zu garantieren [19]. Eine schlechte Haftung der Barrierenmetallisierung zum Metall würde sich hier stark negativ auswirken. In Abbildung 4.2 ist eine Bondverbindung auf IGBT-Ebene dargestellt. Einem 300 µm dicken Bonddraht steht eine circa 3 µm dicke Al-Metallisierung auf Trench-IGBT-Zellen (ca. 5 µm Breite) entgegen.

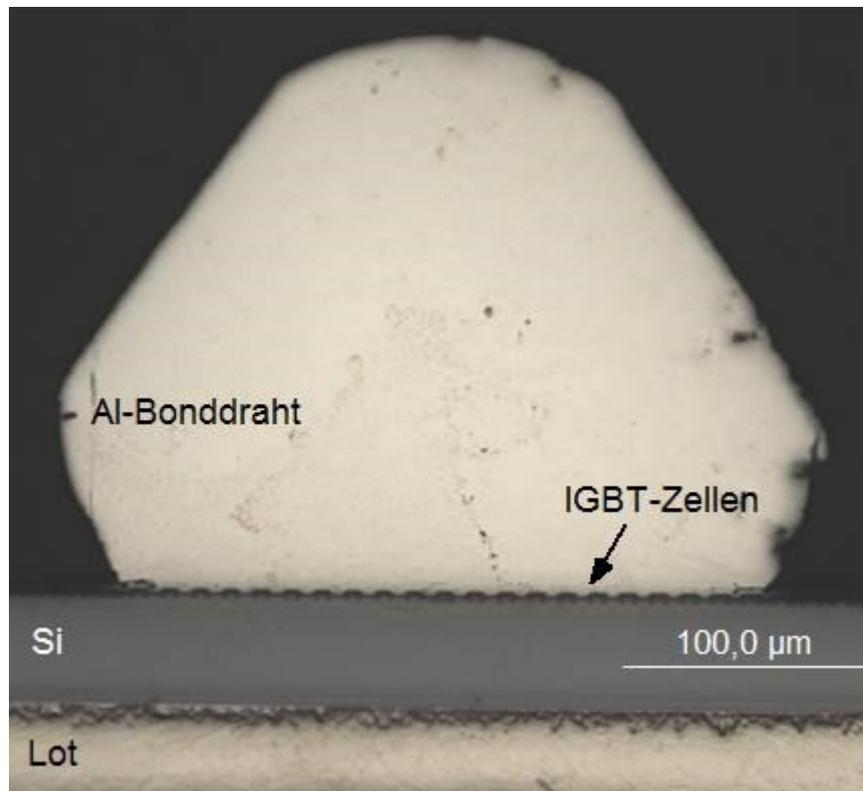


Abbildung 4.2: Al-Bonddraht auf einem Trench-IGBT-Chip.

Als weitere Methode metallische Barrieren abzuscheiden bietet sich das Sputtern an. Zum einen kann die Mikrostruktur über die Prozessparameter angepasst werden, zum anderen kann der Prozess einfach in eine standardisierte Metallisierungssequenz implementiert werden. Um die optimalen Parameter für eine feinkristalline Schicht zu finden, kann das in Kapitel 3.1.1 vorgestellte Strukturzonenmodell nach *Thornton* angewandt werden. Die Sputterparameter müssen so gewählt werden, dass man sich hauptsächlich in Zone T oder

¹ Abscheidung durch eine chemische Reaktion gasförmiger Ausgangsverbindungen zu Reaktionsprodukten, von denen die nicht flüchtigen die abzuschneidende Dünnschicht bilden [23].

im Übergang von T zu 2 bewegt. Diese Zonen besitzen ein dicht gepacktes Gefüge mit kleinen Körnern, welches eine Fremstoffdiffusion verlangsamt [42]. In Kapitel 4.3 wird gezeigt, dass sich hochschmelzende Materialien gut als Barrierenwerkstoffe eignen. Nach dem *Thornton*-Modell sind somit bei typischen Sputtertemperaturen von $< 450\text{ °C}$ (für Dünnschichten $\leq 300\text{ nm}$) die Zonen T oder 2 vorgegeben. Bei zu hohen Prozessdrücken jedoch kann es zu einer porösen und instabilen Schicht mit geringer Dichte (Zone 1) kommen (Abbildung 5.34).

Die Passivität der Barriere ist zudem ein wichtiges Kriterium. Die Barriere sollte keine intermetallischen Phasen mit Al bilden und auch nicht in Al oder Si diffundieren, da dies in Folge zu einer Degradation führen kann. Daher sind bei der Barrierenmaterialauswahl die Diffusionsgeschwindigkeit, die Aktivierungsenergie in Al und Si und folglich die Affinität zu diesen Elementen zu beurteilen. Die strukturelle Stabilität der Dünnschicht kann am Schmelzpunkt des Materials bewertet werden. Im Idealfall sollten Dünnschichten eingesetzt werden, die bei Anwendungs- und Prozesstemperaturen eine niedrige homologe Temperatur (T_h) besitzen, da ab T_h von 0,4 plastische Verformungen zu erwarten sind [53]. In der Praxis sollte dieser Temperaturbereich während der Herstellung und der Anwendung am besten nicht oder, falls es unvermeidlich ist nur kurzzeitig erreicht werden, da hier Veränderungen der Schicht und somit auch der Barriereigenschaften zu erwarten sind.

4.2 Integration in Leistungshalbleiter

Diffusionsbarrieren müssen neben ihrer Stabilität gegenüber Diffusion auch in Halbleiterfertigungsprozessen integrierbar sein, was u.a. Ziel dieser Arbeit ist. Dabei sind sowohl mechanische als auch elektrische Funktionen zu berücksichtigen. Die Abscheidung der Barrierenschicht sollte möglichst einfach in den bestehenden Prozessfluss eines Produktes einzubinden sein. Da die darüber liegende Al-Metallisierung standardmäßig gesputtert wird, wäre eine Abscheidung der Barrierenschicht in einer Sputteranlage von Vorteil. Es könnten somit bestehende Anlagen genutzt und zusätzliche Wege verhindert werden. Um elektrische Potentiale voneinander zu trennen oder Halbleiter zu strukturieren, muss die Barrierenschicht, gleich wie das Al, strukturiert werden. Hierzu stehen nasschemische und plasmachemische Prozesse zur Verfügung. Die Temperaturen bei Abscheidung und Strukturierung dürfen dabei 500 °C nicht übersteigen, da ansonsten Dotierstoffaktivierungen beeinflusst werden oder andere Dünnschichten ihre Eigenschaften ändern. Leistungshalbleiter besitzen typischerweise, bezogen auf ihre Gesamtfläche, sehr große metallisierte Bereiche um hohen Ströme zu tragen, Wärme abzuleiten und als Wärmekapazität im Kurzschlussfall zu fungieren. Zudem sind Topografien von bis zu

5 μm Höhe zu überdecken und Kontaktgräben mit einem Tiefe : Breite-Verhältnis bis 1 : 3 zu verfüllen. Produktspezifische Schichten wie Siliziumdioxid (SiO_2) zur elektrischen Potentialtrennung, welches aufgrund der inerten Oberfläche eine verminderte Haftung zu Folgeschichten besitzt, oder Platinsilizid (Pt_xSi_y) zur Ladungsträgerlebensdauereinstellung, müssen mit der neuen Dünnschicht kompatibel sein. Aus diesen Vorgaben ergeben sich mechanische Schichteigenschaften, die eine Barrierenschichtauswahl einschränken. Um hohe Topografien zu beschichten oder Gräben zu verfüllen sollten Abscheidungen mit höheren Leistungen und/oder RF-Bias verwendet werden (Kapitel 3.1.1). Aufgrund der großen metallisierten Flächen sollten keine Schichten eingesetzt werden, deren mechanischer Schichtstress dazu führen kann, dass Waferkrümmungen oder Schichtdelaminationen entstehen. Die Versuche dieser Arbeit zeigen, dass an Leistungshalbleitern mit einer Waferdicke von circa 300 μm Schichten bis zu 4 GPa mechanischem Stress eingesetzt werden können. Aufgrund der Anwendung in der Bahntechnik und der damit verbundenen hohen Umwelтанforderung sollte die Schicht zudem eine hohe oder zumindest gleich gute Korrosionsbeständigkeit wie die aufliegende Al-Metallisierung besitzen.

Die Barrierenschicht steht in direktem Kontakt zu einkristallinem und polykristallinem Si, sodass der elektrische Kontakt auch über die Barriere hergestellt wird. Beim IGBT ist dies am Emitter bzw. Gate und bei der Diode an der Anode. Die Barriere muss daher sowohl beim IGBT hochdotierte p- und n-Bereiche, sowie bei der Diode niedriger dotierte p-Bereiche ohmsch kontaktieren können und einen möglichst geringen bzw. gleichwertigen Kontaktwiderstand und Schichtwiderstand aufweisen. Es muss darauf geachtet werden, dass keine Elemente eingesetzt werden, die ladungsträgerlebensdauerändernde Eigenschaften besitzen und zusätzliche Rekombinationszentren durch Störstellen im Halbleiter bilden.

4.3 Auswahl des Barrierenmaterials

Zieht man sämtliche erwähnten Grundvoraussetzungen für die einzuführende Barrierenschicht in Betracht, so reduziert sich die Elementauswahl auf einige wenige. Aufgrund der elektrischen Leitfähigkeit und des ohmschen Kontaktierens von p- und n-dotiertem Si kommen nur Metalle in Betracht. Die Stabilität des Gefüges spiegelt sich im Wesentlichen im Schmelzpunkt des Werkstoffes wider. Neben dem Schmelzpunkt sind aber auch die Diffusionsgeschwindigkeit und/oder die Aktivierungsenergie in das direkt kontaktierte Al von Bedeutung.

Im Laufe dieser Diskussion wird sich zeigen, dass der Reaktion von dem Barrierenmaterial mit Al in der bisherigen Diffusionsbarrierenforschung nicht genug Bedeutung eingeräumt

wurde. Werte für Aktivierungsenergie und Diffusionsgeschwindigkeiten bei Temperaturen unter 500 °C sind nur teilweise in der Grundlagenliteratur vorhanden. Dies erschwerte die vorherige Auswahl, sodass die grundlegende Diffusivität der Materialien erst getestet werden musste. Die bereits erwähnte Eigenschaft der Haftung auf Silizium und Siliziumoxid kann z.B. in der Veröffentlichung von *Trapp et al.* [48] nachgeschlagen werden. Jedoch sind die Werte nicht für jeden Werkstoff vorhanden. Wie bereits gezeigt, ist die potentielle Korngröße ein entscheidender Faktor. Unter Berücksichtigung der Abscheideparameter der Dünnschicht kann zwar die Korngröße beeinflusst werden, jedoch ist die Schmelztemperatur erneut für die polykristallinität der Schicht maßgeblich. Niedrigschmelzende Materialien tendieren eher zu einer Vergrößerungen der Körner, da weniger Energie für die Oberflächendiffusion und die Volumendiffusion zur Verfügung stehen muss damit sich die Körner vergrößern. In Tabelle 4.1 sind jene Elemente aufgelistet, die aufgrund der beschriebenen Eigenschaften für die weiterführenden Tests ausgewählt wurden. Neben dem Schmelzpunkt befindet sich auch die subjektive Bewertung bezüglich der Haftung auf Siliziumoxid in dieser Tabelle. Sowohl diese Einschätzung als auch Werte für die Diffusionsgrößen in Al wurden, wenn vorhanden, aus Veröffentlichungen oder der Grundlagenliteratur entnommen und entsprechend verwiesen. War kein Verweis vorhanden, so wurden dieser Parameter im Rahmen dieser Untersuchung erarbeitet. Der Fokus lag auf Diffusionsbarrieren, deren Hauptbestandteile Wolfram oder Tantal waren. Diese beiden Werkstoffe zeichnen sich durch eine gute Kontaktierbarkeit von dotiertem Silizium, einer akzeptablen Haftung auf Silizium und Siliziumoxiden (Si_xO_y) und durch einen sehr passiven Charakter aus. Der passive Charakter ist am hohen Schmelzpunkt und an den niedrigen Diffusionsgrößen im Al sichtbar. Im Hinblick auf die Schmelztemperaturen können laut Periodensystem auch die Elemente Rhenium und Osmium mögliche Werkstoffe für eine solche Anwendung sein. Der Wert des Schmelzpunkts liegt bei beiden Kandidaten niedriger als bei Wolfram. Die Materialverfügbar (Sputtertargets) ist zudem aufgrund von Sonderherstellungen deutlich schwieriger. Bezüglich der elektrischen Eigenschaften ist keine Aussage möglich, da bisher keine akademischen Untersuchungen an solchen Dünnschichten vorgenommen wurden.

Tabelle 4.1: Ausgewählte Elemente zur Anwendung als Dünnschichtbarrieren und ihre Eigenschaften

	W	Ta	WTi
T_s [K]	3695	3290	-
D_0 in Al [$10^{-4} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$] [54]	$2,2 \times 10^5$	-	Ti: 1,12
E_a in Al [eV] [54]	3,36	-	Ti: 2,28
Adhäsion auf SiO_2 [48]	+	+	++
Korngröße [nm]	50	10 - 20; 31 [55]	21; 13 -15 [56],
Schichtwiderstand [$10^{-6} \Omega\text{m}$]	0,1 - 0,15 [48]	1,76; 2,0 [55]	0,58; 0,65 [48]

Die Materialien W und Ta wurden in Vorversuchen untersucht um Haftung, Barrierenwirkung und grundlegende elektrische Eigenschaften zu testen. Die verwendeten Testverfahren werden in den folgenden Kapiteln ausführlich beschrieben. Der Barrierentest soll Aufschluss darüber geben, ob das Material per se eine Barriere ist und eine Optimierung der Dünnschicht bzw. die Integration in den Gesamtprozess Sinn ergibt.

Gesputtertes Wolfram zeigte in den Vorversuchen kein gutes Barrierenverhalten. Ein großes Problem besteht in seiner Haftung. Ab einer Schichtdicke von circa 20 nm delaminiert W von Si und Si_xO_y . In weiteren Versuchen wurde daher eine sehr dünne W-Schicht (<20 nm) in Verbindung mit einer Ti-Haftschrift (≈ 10 nm) kombiniert. Diese Schicht erwies sich allerdings als nicht zuverlässig gegenüber Diffusion. Bei einer erwarteten Korngröße des Wolframs von circa 50 nm können sich direkte Diffusionspfade über einzelne Korngrenzen bilden.

Als Alternative bot sich die Pseudolegierung WTi an. Sie besitzt die passiven Eigenschaften des Wolframs und zeichnet sich in Kombination mit dem Ti-Anteil durch gute Haftung auf Silizium und Siliziumoxiden aus [48] [12]. Zudem ist eine Korngröße von <20 nm zu erwarten [56]. Die Vorversuche zeigten für diese Dünnschicht sowohl eine gute Haftung als auch eine gute Barrierenwirkung.

Ta als Dünnschicht haftete auch sehr gut auf Si und Si_xO_y und zeigte eine akzeptable Barrierenwirkung. Der etwas geringere Schmelzpunkt im Vergleich zu W und der höhere elektrische Schichtwiderstand führten allerdings dazu, dass die Schicht erst an zweiter Stelle getestet wurde. Die Auswahl der zu testenden Barrierenlemente hat aufgrund der gezeigten Vorauswahl ergeben, dass zuerst die Dünnschicht WTi (Kapitel 5.3 - 5.6.6) und im Folgenden Ta (Kapitel 7) bewertet wurden. Der Fokus lag dabei auf dem mikrostrukturellen Verständnis der Dünnschicht und deren Abscheidung. Darauf aufbauend wurde das Langzeitverhalten bewertet und die Ausfallmechanismen detektiert. Im Weiteren wurde eine Lösung für das Blockieren dieses Ausfallmechanismus gezeigt.

5 Ergebnisse und Interpretation

5.1 Voruntersuchungen zu Wachstumsmechanismen von Al-Spikes

Aufgrund der Ergebnisse, die in diesem Kapitel beschrieben sind, wurde ein US-Patent mit der Anmeldenummer 13/472,949 eingereicht [57]. Die identische Anmeldung wurde bereits in China unter der amtlichen Nummer CN103426905A erteilt.

In Kapitel 2.2.1 wurden bereits das Al-Spiking und die Diffusionsprozesse zwischen Al und Si erläutert. Nun soll gezeigt werden, wie Al-Spikes entstehen und im Laufe eines Alterungsprozesses wachsen oder sich verändern. Diese Betrachtung ist notwendig, um die Auswirkung einer fehlerhaften Diffusionsbarriere abzuschätzen. Wie in Abbildung 2.6 zu erkennen ist, wächst ein Spike in die Tiefe des Substrats aufgrund der Diffusion von Si ins Al. Die Form dieser Spikes erinnert im Endstadium an eine quadratische Pyramide. Die Seitenflächen sind Dreiecke, die möglicherweise an einer Kristallebene liegen. Aufgrund der Symmetrie der Al-Spikes kann vermutet werden, dass die Kristallorientierung des Si-Substrats Einfluss auf die Form besitzt.

Um den Wachstumsmechanismus der Al-Spikes zu untersuchen wurden Versuche an 2 Si-Substratmaterialien mit unterschiedlicher Kristallorientierung getätigt. Zusätzlich wurde an (100)-orientierten Wafern die Kristallqualität gezielt über eine Implantation gestört. Die zeitliche Abhängigkeit der Spikebildung wurde bei 300 °C, 400 °C und 450 °C HTS-Test (*high temperature storage*) ermittelt. Alle Wafer wurden analog den Barrierentestscheiben (Kapitel 5.1) vorbereitet und mit einer WTi-Barriere (50 nm) und einer AlCu-Metallisierung (1 µm) besputtert. Um das Al-Spiking nach dem HTS-Test bewerten zu können wurden die Metallisierung und die Barrierenschicht nasschemisch entfernt, sodass nur noch das Si-Substrat stehen blieb (Kapitel 5.2). Um einen Querschliff für eine REM-Analyse herzustellen reichte es aus das Substrat zu brechen und an der Bruchfläche zu untersuchen. Die WTi-Barriere (siehe Kapitel 5.3.1) verursachte nach circa 4 h Temperaturbelastung ein lokal begrenztes Al-Spiking, sodass die Diffusion auf nur einige wenige Spikes begrenzt war. An diesen lokalen Fehlstellen der Barriere wurde das Wachstum der Al-Spikes evaluiert. Als Referenz wurden auch Wafer ohne Barrierenschicht hergestellt, an denen das ganzflächige Spiking beurteilt wurde.

Al-Spikewachstum auf (100)-Si-Substrat

In Abbildung 5.1 wird das Al-Spiking nach 400 °C HTS-Test mit unterschiedlichen Belastungszeiten verglichen. Zusätzlich wird das Spikingverhalten mit einer anisotropen Ätzung mit KOH und Isopropanol (wässrige alkalische Lösung) verglichen. Die Proben wurden wie zuvor beschrieben vorbereitet. Die Probe in Abbildung 5.1.a zeigt ein pyramidenförmiges Spiking in die Tiefe des Si-Substrats nach 14 h und 400 °C Belastungstest. Die Seitenflächen der Pyramide schließen einen Winkel von circa 54° zur (100)-Kristallfläche ein. In Abbildung 5.1.b ist die gleiche Probe nach einer 400 °C und 14 h Belastung gezeigt. Das Al-Spiking ist stark verbreitert und es sind keine geometrischen Pyramiden mehr zu erkennen. Im Vergleich mit der 10 h kürzer getemperten Probe sind die Spikes bezüglich ihrer Tiefe im Si-Kristall vergleichbar. Sobald im Diffusionsvorgang die Spitze der Pyramide erreicht ist, kann kein Si mehr aus (100)-Richtung verbraucht werden. Daraufhin wächst der Spike nur noch in die Breite, da er nun Si aus der (111)-Richtung verbraucht.

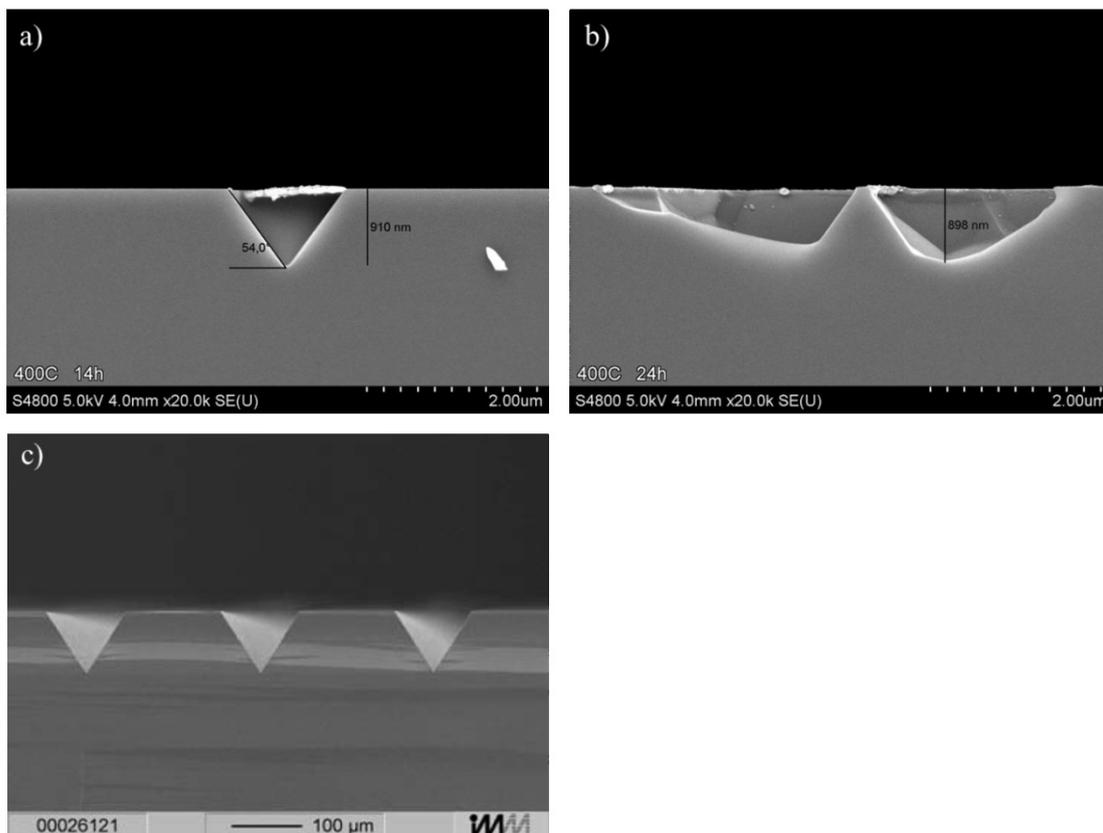


Abbildung 5.1: REM-Analyse des Al-Spikings auf einem Si-Substrat (100) nach a) HTS-Test bei 400 °C für 14 h, b) HTS-Test bei 400 °C für 24 h und c) der anisotropen Ätzung von Si-Substrat (100) mit KOH und Isopropanol [22]. In Abbildung a) und b) wurden die Barrierenschicht WTi und die Metallisierung AlCu nasschemisch entfernt.

Zum Vergleich ist in Abbildung 5.1.c ein mit Kaliumhydroxid (KOH) und Isopropanol geätztes (100)-Si-Substrat aus *Völklein et al.* [22] dargestellt. Mit diesem anisotropen Ätzverfahren kann entlang der (111)-Kristallebene geätzt werden, da die Ätzraten je nach

Kristallebene stark differieren. Die (111)-Kristallebene schließt einen Winkel von $54,7^\circ$ zur (100)-Ebene ein [20]. Es ist deutlich zu erkennen, dass ein Al-Spike, ähnlich wie beim anisotrope Ätzen, entlang der (100)-Kristallebene wächst. Seine Tiefe ist somit in erster Instanz abhängig von der Grundfläche, respektive der Barrierenfehlstelle (*spiking*) oder der Lackmaske (Ätzen). In beiden Fällen wird Si in einer höheren Rate aus der (100)-Kristallebene verbraucht, sodass diese charakteristische Form entsteht.

Es ergibt sich für das Al-Spiking auf (100)-Si-Substrat mit Diffusionsbarriere folgendes Wachstumsmodell:

- Die Fehlstellen in der Barrierenschicht bestimmen die Grundfläche und somit auch die Gesamttiefe des Al-Spikes.
- Si wird aufgrund der Löslichkeit in Al aus dem Si-Substrat verbraucht. Dies geschieht in einer höheren Rate aus der (100)-Ebene als aus der (111)-Ebene. Die Seitenflächen der Al-Spikepyramide sind parallel zur (111)-Kristallebene des Si-Kristalls. Es entsteht ein Pyramidenstumpf.
- Dieser Vorgang findet so lange statt, bis die Pyramidenspitze erreicht ist.
- Bei weiterer Temperaturbelastung wird Si mit einer langsameren Abtragsrate auch aus der (111)-Ebene verbraucht. Der Al-Spike wächst in die Breite.

Al-Spikewachstum auf (111)-Si-Substrat

Aufgrund der beschriebenen Ergebnisse für das Al-Spiking auf (100)-Si-Substrat ist ein unterschiedliches Verhalten auf einem Si-Substrat mit (111)-Kristallorientierung zu erwarten. In Abbildung 5.2 ist das Al-Spiking auf einem (111)-Si-Substrat dargestellt. Es ist an der REM-Aufsicht deutlich zu erkennen, dass die Al-Spikes in einer Pyramidenstruktur wachsen. Die Seitenflächen sind erneut parallel zur (111)-Richtung. In diesem Fall wächst der Spike horizontal auf dem Substrat. Die Tiefe des Al-Spikes ist verglichen mit dem (100)-Si-Substrat bei gleicher Belastung um etwa $1/3$ reduziert. Das wird durch die geringe Abtragsrate in (111)-Ebene erklärt. Sobald Material aus der (111)-Ebene abgetragen ist, kann Si auch aus (100)-Ebenen ausdiffundieren und das Spikewachstum wird beschleunigt, allerdings in horizontaler Richtung bezogen auf die Oberfläche des Si-Substrats. Die Tiefe der Spikes wird auch bei längeren Temperaturbelastungen nur wenig verändert. Auch dies ist eine Folge der geringen Abtragsrate aus der (111)-Kristallrichtung.

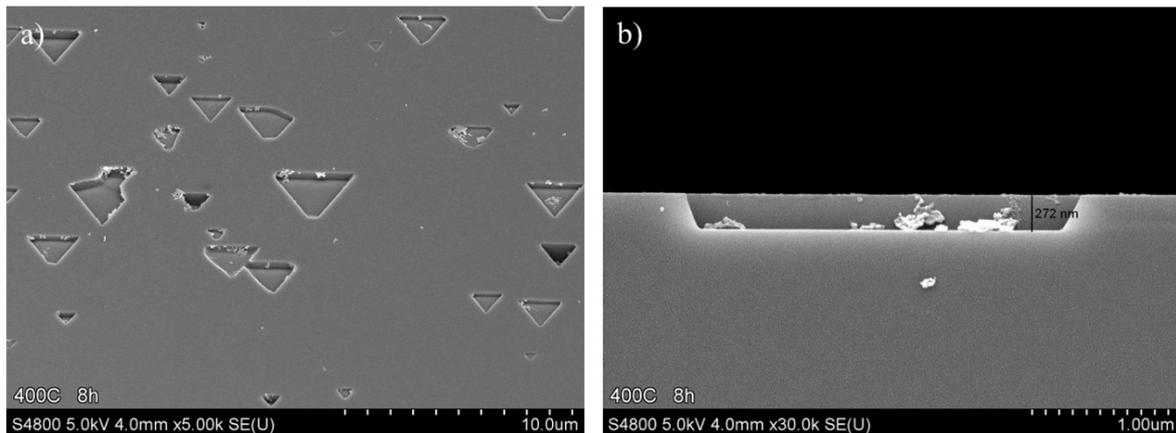


Abbildung 5.2: REM-Aufnahme als a) Aufsicht und b) Querschliff von Al-Spiking auf (111)-Si-Substrat nach HTS-Belastung bei 400 °C für 8 h.

Al-Spikewachstum auf geschädigtem (100)-Si-Substrat

Leistungshalbleiter werden typischerweise an ihrer Grenzfläche zum Metall hoch dotiert um eine ohmsche Kontaktierung durch Feldemission zu ermöglichen. Diese Dotierungen sind oftmals nur unzureichend ausgeheilt, sodass der Kristall aufgrund der Implantation geschädigt bleibt. Nun stellt sich die Frage, wie das Al-Spiking auf eine derartige Kristallschädigung reagiert. Es ist zu erwarten, dass ungeordnete Kristallfragmente mit verminderter Bindungsenergie vorliegen. Aufgrund des folgenden höheren Verbrauchs an Si aus dem geschädigten Bereich wird sich ein Al-Spiking zeigen, welches keine ideale Pyramidenform besitzt. In Abbildung 5.3 ist das Verhalten des Al-Spikings auf unterschiedlich geschädigtem Si-Substrat gezeigt. Die Proben wurden analog den vorhergegangenen Proben vorbereitet. Die Implantationen wurde mit Bor, Phosphor und Arsen mit Hilfe eines industriellen Implanters realisiert. Als Energie wurde in allen Fällen 100 keV und eine Dosis von $5 \times 10^{15} - 8 \times 10^{15}$ Atome/cm² verwendet, wie sie auch in einer Leistungshalbleiterprozessierung zur Anwendung kommt. Die Implantation wurde über ein sogenanntes Streuoxid durchgeführt um ein *channeling* zu vermeiden [58]. Die dargestellten Simulationen, welche die Eindringtiefe der Implantation repräsentieren, wurden mit dem Programm TRIM (*Transport of Ions in Matter*) durchgeführt, welches auf einer *Monte Carlo*²-Simulationsmethode basiert. Die Referenz ohne Implantation zeigt das zu erwartende Spiking-Verhalten, wie es auch schon zuvor in dem Kapitel beschrieben wurde. Alle Proben mit einer Implantation zeigen hingegen ein Al-Spiking mit veränderter Form. Wie erwartet liegt das an dem geschädigten Si-Kristall. Außerdem ist eine gute Korrelation zu den Simulationsergebnissen erkennbar. Aufgrund der Größe und der Masse der implantierten Atome sind die maximale Eindringtiefe und die Spitzenkonzentrationstiefe jeweils unterschiedlich. Arsen-Ionen (As) können nur sehr flach in den Si-Kristall eindringen, da es zu vielen Kollisionen mit dem Kristall kommt. Diese

² *Monte Carlo*-Simulation ist ein Verfahren bei dem komplexe Fragestellungen durch häufig durchgeführte Zufallsexperimente numerisch gelöst werden.

Kollisionen wiederum führen zu einer hohen Kristallschädigung. Phosphor (P) und vor allem Bor (B) haben eine deutlich höhere Eindringtiefe in den Si-Kristall. Diese Eindringtiefe spiegelt sich in der Kristallschädigung und somit auch im Al-Spiking wider. Arsen zeigt nur sehr oberflächennahes Al-Spiking. Dies liegt an der hohen Kristallschädigung dieser Implantation. Durch die Zerstörung des idealen Kristalls existieren für den Si-Abtrag keine Vorzugsrichtungen mehr. Ähnliches ist auch für Bor- und Phosphorimplantationen zu beobachten, allerdings in einer höheren Eindringtiefe, da diese Implantationen Kristallschädigungen bis zu 480 nm nach sich ziehen. Das Spiking wächst bis zu dieser Tiefe nicht ideal, sondern verbreitert sich horizontal und es entstehen nahezu halbkreisförmige Al-Löcher. Das Spiking ist verglichen mit einem unbeschädigten Substrat nicht mehr so tief, da keine Vorzugsrichtungen für den Abtrag existieren und somit mehr Material aus horizontaler Richtung zur Verfügung steht. Eine zusätzliche oberflächennahe Implantation bewirkt also eine Art Amorphisierung, welche dazu führt, dass das Al-Spiking nicht mehr so tief ist. In der Anwendung z.B. einer Leistungsdiode wird diese Eigenschaft so genutzt, dass vergrabene Strukturen im Silizium zusätzlich vor einem Kurzschließen mit der rückseitigen Kathode geschützt werden.

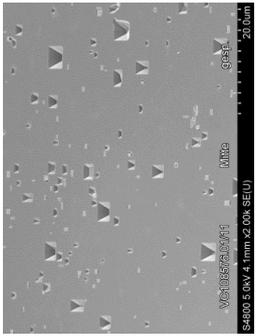
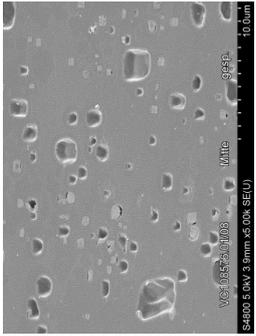
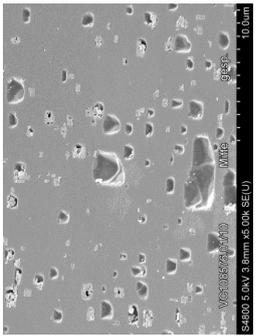
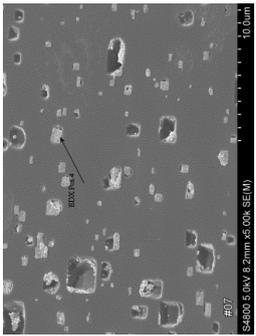
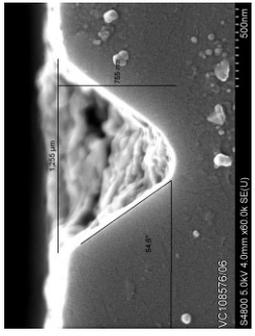
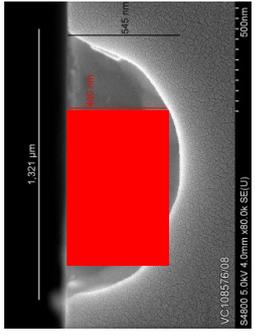
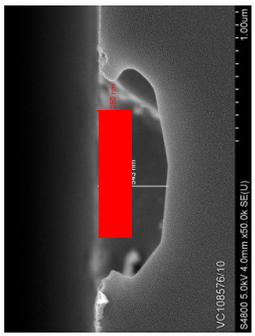
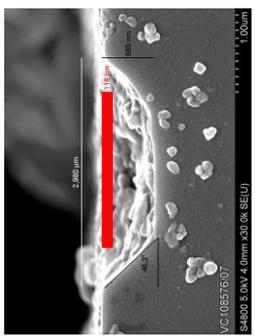
		keine Implantation	Bor $E_i = 100 \text{ keV}, D_i = 5 \times 10^{15}$	Phosphor $E_i = 100 \text{ keV}, D_i = 5 \times 10^{15}$	Arsen $E_i = 100 \text{ keV}, D_i = 8 \times 10^{15}$
REM Aufsicht					
REM Querschliff					
Simulation	Peak: - EoR: -	Peak: 280 nm EoR: 480 nm	Peak: 100 nm EoR: 250 nm	Peak: 50 nm EoR: 119 nm	

Abbildung 5.3: Al-Spikewachstum auf unterschiedlich geschädigtem Si-Substrat nach HTS-Test bei 400 °C für 14h und Vergleich mit TRIM-Simulationsergebnissen der Eindringtiefen der implantierten Dotierstoffe (Peak: maximale Dotierstoffkonzentration, EoR (*End of Range*): maximale Dotierstofftiefe).

5.2 Experimentelle Herstellung der Testwafer

Die Probenherstellung fand ausschließlich in Reinraumumgebung der Klassen ISO 5 und ISO 6 statt [59]. Alle Proben wurden auf FZ-Wafern in (100)- und (111)-Kristallrichtung hergestellt. Alle (100)-orientierten Wafer hatten eine Phosphor-Grunddotierung, wobei hingegen die (111)-orientierten Wafer eine Bor-Grunddotierung aufwiesen. Es sei jedoch an dieser Stelle angemerkt, dass die intrinsische Grunddotierung des Substrats keinen Einfluss auf die darüber liegende, metallische Barriere hat, sondern nur auf die elektrischen Eigenschaften des Bauelements. Für diese Tests wurden hochohmige Wafer mit einer Leitfähigkeit zwischen 290 und 330 Ωcm benutzt, sodass die Leitfähigkeit extrinsisch erzeugt werden musste. Für die Barrieren- und elektrischen Tests wurden grundsätzlich (100)-orientierte Wafer verwendet. Die (111)-orientierten Wafer wurden lediglich vergleichend für die Analyse des Fehlerfalls Spiking benutzt, da dort die Kristallorientierung des Substrats einen signifikanten Einfluss hat. Der Durchmesser der verwendeten Wafer variierte in Abhängigkeit der verwendeten Prozesse zwischen 150 und 200 mm.

Die Proben werden in drei Gruppen unterteilt. Die erste Gruppe beinhaltet Proben, die hergestellt wurden, um die Barrierendichtigkeit der jeweiligen Testschicht zu beurteilen, im Folgenden „Barrierentestscheiben“ genannt. Die zweite Gruppe besteht aus Wafern, die eine elektrische Kontaktierung ermöglichen, um elektrische Eigenschaften wie Kontaktwiderstand und Schichtwiderstand auf Si-Untergründen zu beurteilen, im Folgenden „elektrische Testscheiben“ genannt. Die elektrischen Testscheiben wurden mit Barrieren hergestellt, welche zuvor eine gute Barrierenwirkung auf den Barrierentestscheiben gezeigt hatten. Dünnschichten, die sowohl dicht gegenüber Diffusion waren als auch vielversprechende elektrische Eigenschaften aufwiesen, wurden auf Produktebene implementiert und stellen die dritte Probengruppe dar. Das Ziel bestand darin, die potentielle Machbarkeit der Integration in den Gesamtprozess eines Leistungshalbleiters zu zeigen und die elektrischen Auswirkungen zu überprüfen. In Abbildung 5.4 sind die jeweiligen Gruppen mit ihren Prozessführungen dargestellt. Alle verwendeten Wafer wurden zuerst mit einer Laserbeschriftung versehen, um die eindeutige Identifizierbarkeit der Versuchsscheiben zu gewährleisten. Bevor nun abscheidespezifische Prozesse folgten, wurden die elektrisch aktiven Strukturen auf den elektrischen Testscheiben erzeugt. Dazu wurden entweder p^+ - oder n^+ -Dotierungen in definierter Dosis und Energie eingebracht und anschließend elektrisch, mit Hilfe eines Temperaturprozesses aktiviert. Hierbei wurden zusätzlich die zu erwartenden Kristallschädigungen durch die angewandte Temperatur ausgeheilt. Das an der Substratoberfläche entstandene SiO_2 wurde daraufhin mit Flusssäure (HF) entfernt. Um den Einfluss von Platinsiliziden (Pt_xSi_y) auf

den ohmschen Kontakt zu untersuchen wurde auf mehreren Scheiben ein Platin-Prozessblock eingeführt, der eine Pt-Bedampfung, einen Silizidierungsprozess und einen Ätzprozess zur Entfernung von nicht silizidiertem Platin beinhaltete. Das Überprüfen dieses Einflusses ist notwendig, da eine deutliche Verschlechterung des p-Kontaktes zu erwarten ist, wenn Al als direkter Kontakt wegfällt und somit die p-dotierende Wirkung ausbleibt. Pt kann als einziges Silizid, neben Iridiumsilizid die Schottky-Barrierenhöhe zum Valenzband reduzieren [49]. Die Gruppe der produktiven Wafer einer IGBT- oder Diodentechnologie wurden nach dem Laserbeschriften den Prozessen der jeweiligen Technologie zugeführt. Der Prozessblock „Barrierenintegration“ wurde in diesen Ablauf miteingegliedert. Der Prozessblock war für alle Gruppen nahezu identisch. Vor der Abscheidung der Barrierenschicht und des Metalls wurde von der Si-Oberfläche das native SiO_2 mit Hilfe von Flußsäure (HF) entfernt. Um eine vollständige Entfernung zu gewährleisten, wurde mittels einer 7-minütigen Ätzung deutlich überätzt. Die Selektivität von SiO_2 zu Si ist so hoch, sodass keine Ätzung von Si eintrat. Die anschließende Reinigung mit dem „*standard clean 1*“ entfernte organische und der „*standard clean 2*“ metallische Partikel und Reste [60]. Die Barrieren- und Metallisierungsabscheidungen fanden im direkten Anschluss an die Ätzung statt, um eine erneute Bildung von natürlichem SiO_2 zu verhindern. Die Abscheideparameter sind den jeweiligen Kapiteln zu entnehmen. Die Strukturierung der Barrieren- und Metallschicht war nur bei den Gruppen der elektrisch aktiven Wafer erforderlich. Dazu wurde zuerst ein Lack aufgebracht und über eine Maske belichtet und entwickelt. Es war darauf zu achten, dass der Lack in Dicke und Selektivität dem jeweiligen Ätzverfahren entsprach. Eine genaue Übersicht der Lithographie und deren Prozesskette wird z.B. in Veröffentlichungen von Völklein et al. [22] gegeben. Nach spezifischen Reinigungsverfahren, wie z.B. einer Polymerentfernung nach dem Plasmaätzen, wurden die IGBT- und Diodentechnologien den restlichen Prozessen der Fertigung zugeführt. Die elektrischen Testscheiben wurden hingegen noch zusätzlich mit einem Siliziumnitrid (SiN) mittels Plasma-unterstützter CVD passiviert um oberflächennahe Kriechströme bei den elektrischen Messungen zu verhindern. Die Barrierentestscheiben und die elektrischen Testscheiben wurden daraufhin in inerte N_2 -Atmosphäre mit leichtem Überdruck bei unterschiedlichen Temperaturen gelagert, im Folgenden HTS-Test (*high temperature storage*) genannt. Um an den Barrierentestscheiben die Diffusionsstabilität zu beurteilen, wurden die Al-Metallisierung mit einer Mischung aus Phosphorsäure (H_3PO_4) und Salpetersäure (HNO_3) bzw. die Barrierenschicht (WTi(N)) mit Wasserstoffperoxid (H_2O_2) wieder entfernt.

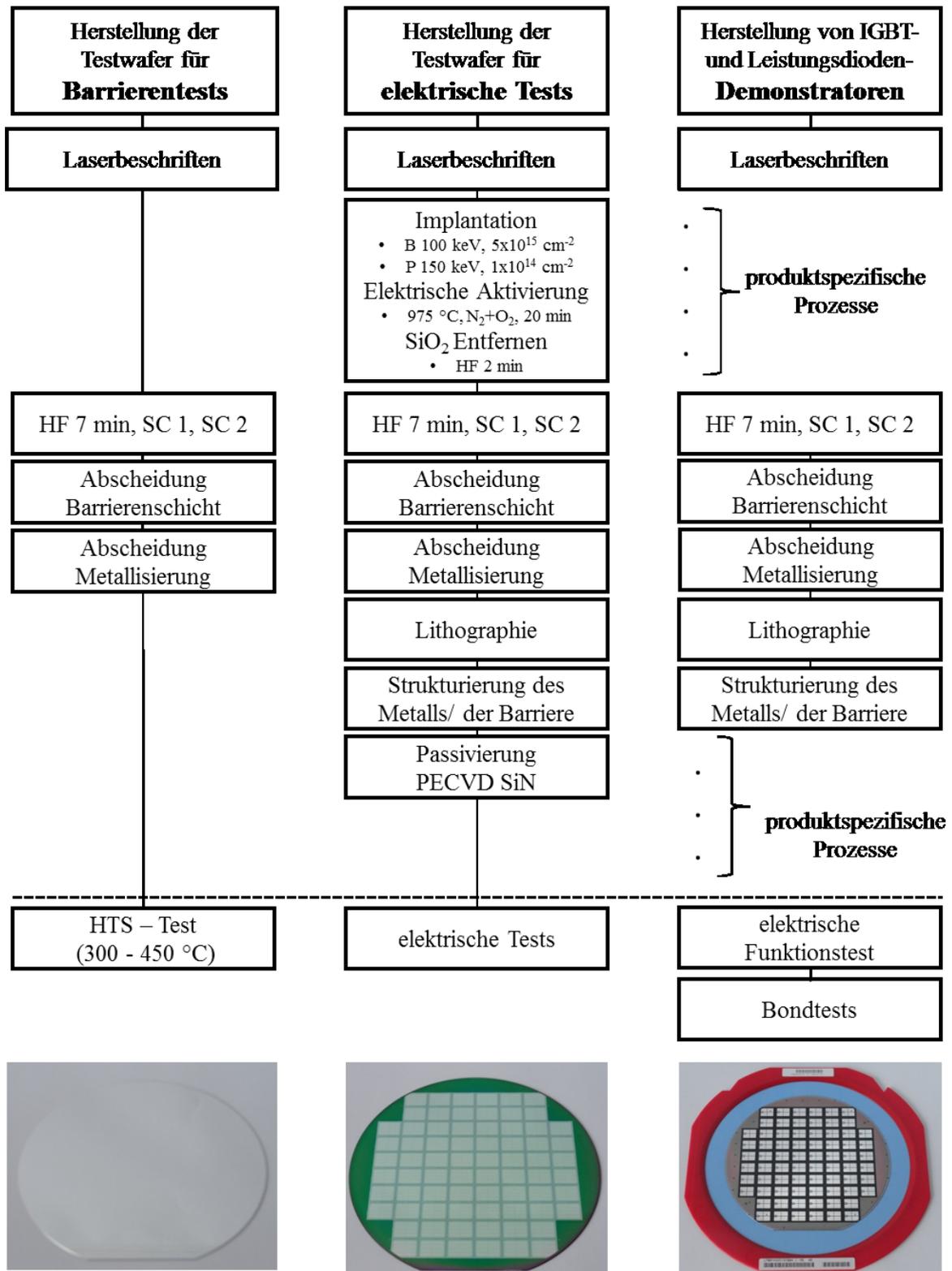


Abbildung 5.4: Herstellung und Einteilung der Proben in die drei Gruppen der Testwafer.

Zur Charakterisierung der Dünnschichten wurden zusätzlich zu den in Abbildung 5.4 gezeigten noch weitere Proben hergestellt. Mit „Charakterisierung“ ist die Ermittlung von folgenden spezifischen Schichteigenschaften gemeint:

- Mechanischer Schichtstress (σ_f)
- Schichtwiderstand (R_{\square})
- Abscheiderate
- Stöchiometrie
- Mikrostrukturermittlung

Alle Eigenschaften wurden auf Wafern untersucht, die analog dem Prozess der Barrierentestscheiben hergestellt wurden. Diese Scheiben wurden allerdings ohne Al-Metallisierung hergestellt. Einzige Ausnahme bildete der Parameter Schichtwiderstand. Um eine mögliche Leitfähigkeit des Substrats auszuschließen wurden hierfür nur thermisch oxidierte Wafer ohne vorangehende HF-Ätzung benutzt.

5.3 Herstellung der WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren

5.3.1 PVD-Sputterabscheidung

Die Sputterabscheidung der WTi-Dünnschicht ist sehr komplex und deren Untersuchung erforderte sowohl theoretische, simulative als auch praktische Versuchsaufbauten. Die Komplexität ergibt sich durch die Kombination von Wolfram (W) und Titan (Ti) im Target. Die hohe Differenz der relativen Atommassen von W (183,8 u) und Ti (47,9 u) kann dazu benutzt werden die Schichteigenschaften, je nach Prozessbedingungen, zu verändern. In diversen Veröffentlichungen wurden einzelne Parameter und deren Einfluss auf die Schichteigenschaften bewertet [61] [62] [63] [64]. Ziel der vorliegenden Untersuchung war es hingegen, die möglichen Variationen des Sputterprozesses im Hinblick auf Barrierenstabilität und Integration in Leistungshalbleiter zu überprüfen. Als erstes wird die Sputterabscheidung mit den möglichen Prozessvariationen und deren Einfluss auf die direkt messbaren Parameter Stöchiometrie, Stress und Schichtwiderstand beschrieben. Darauf aufbauend wird die Mikrostruktur der am vielversprechendsten Varianten bewertet.

In Abbildung 5.5 ist das Phasendiagramm von Ti und W dargestellt. Es ist ersichtlich, dass bei Raumtemperatur keine stabile Phase existiert. Bei der Targetherstellung werden Ti und W in Form eines Pulvers bei circa $0,13 \times 10^{-3}$ mbar Kammerdruck, hohen Temperaturen und 345 bar Sinterdruck in einem Ofen verpresst. Daraus entstehen Sputtertargets, die aus WTi-Mischphasen in unterschiedlicher Stöchiometrie bestehen [65]. Es ist davon auszugehen, dass diese Mischkristalle bei der Sputterabscheidung zerstört werden und W und Ti getrennt in der Transportphase des Sputterprozesses vorliegen. Später in diese Arbeit wird jedoch gezeigt, dass die kondensierte Dünnschicht je nach Prozessbedingungen erneut

Mischphasen enthalten kann. Der Werkstoff WTi wird daher häufig als Pseudolegierung bezeichnet.

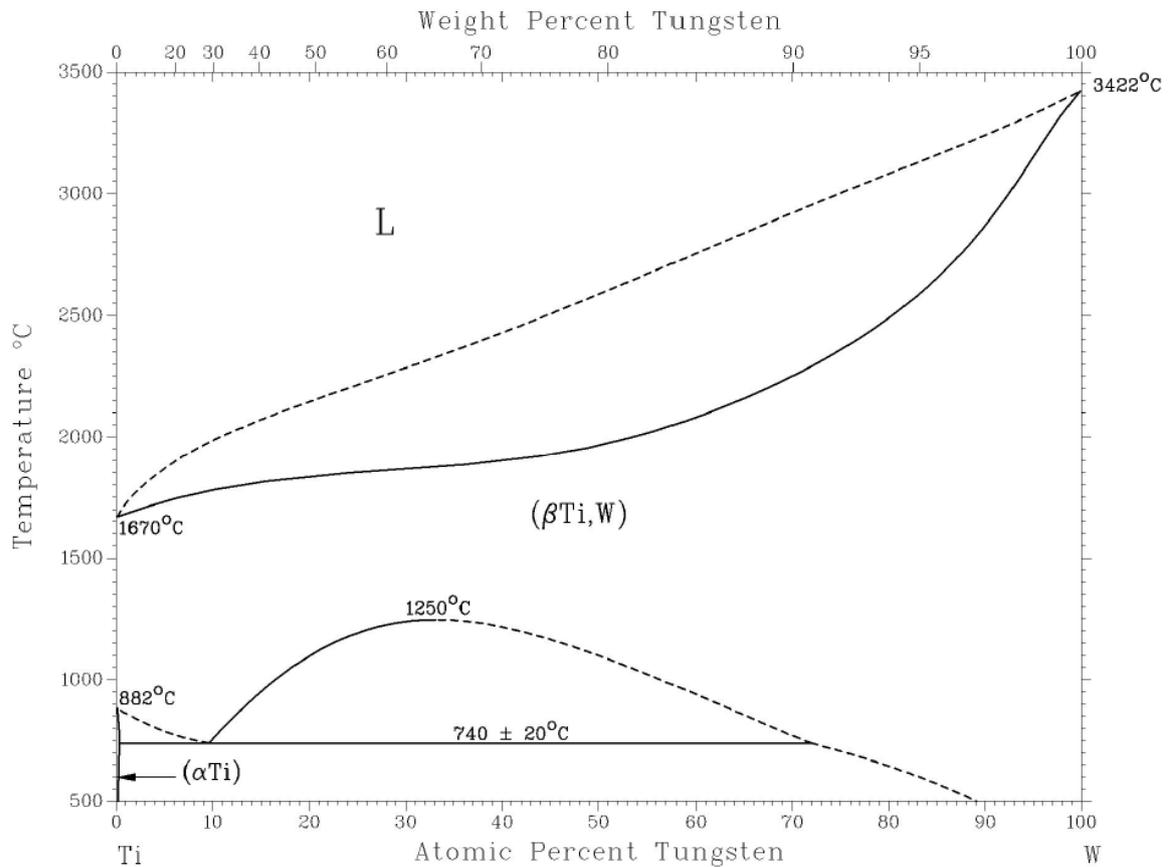


Abbildung 5.5: Phasendiagramm Titan-Wolfram [7].

Theoretische Überlegungen

Der Energietransfer beim Sputterprozess von Edelgasionen zu Targetatomen kann vereinfacht über das Modell der elastischen Kollision unter Miteinbeziehen der Energie- und Impulserhaltung beschrieben werden [66]. Demnach ergibt sich für den Energietransfer $T_m(E_2)$ von einem Ion des Edelgases mit der Masse m_1 und der Energie E_1 auf ein Atom des Sputtertargets mit der Masse m_2 folgende Beziehung [67]:

$$T_m = E_2 = E_1 \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad (5.1)$$

Dieser Zusammenhang besagt, dass der Energieübertrag auf das Targetatom desto höher ist, je ähnlicher sich die Massen m_1 und m_2 sind. Das Prinzip der Energieerhaltung hängt des Weiteren folgendermaßen mit der Energie des reflektierten, nun neutralisierten Atoms des Edelgases (E_r) zusammen:

$$E_r = E_1 \left(\frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \right)^2 \quad (5.2)$$

Die Berechnung der Verhältnisse der übertragenen (E_2/E_1) und der reflektierten Energie (E_r/E_1) kann folgendermaßen erfolgen,

$$\frac{E_2}{E_1} = \frac{4m_1m_2}{(m_1 + m_2)^2} \quad (5.3)$$

$$\frac{E_r}{E_1} = \left(\frac{m_2 - m_1}{m_2 + m_1} \right)^2 \quad (5.4)$$

wobei unter idealer Annahme die Energieerhaltung

$$\frac{E_2}{E_1} + \frac{E_r}{E_1} = 1 \quad (5.5)$$

ergeben muss. Bei Betrachtung dieser Zusammenhänge wird einerseits klar, dass der Energieübertrag auf W respektive Ti nicht im gleichen Maße möglich ist. Andererseits ist zu erkennen, dass die relative Atommasse des Sputtergases einen großen Einfluss besitzt. Als Standard wird Argon (Ar) als Entladungsgas an Sputteranlagen verwendet [12], was in diesem Fall zu einer hohen Differenz der Atommasse (Ar = 39,9 u) zu dem Targetelement W (183,8 u) führt. In Tabelle 5.1 sind die errechneten Werte der übertragenden und der reflektierten Energie aufgelistet.

Tabelle 5.1: Errechnete Werte der Energieüberträge für Ti- und W-Sputtern mit Ar

	W	Ti
E_2/E_1	0,59	0,99
E_r/E_1	0,41	0,01

Ti kann mit Ar als Sputtergas nahezu ideal abgetragen werden. Nahezu 100% der Energie des einfallenden Edelgasions können auf das Targetatom Ti übertragen werden, sodass < 1% reflektiert wird. W hingegen kann mit Argon nur hinreichend gut abgetragen werden. Über 40% der Energie werden reflektiert. Dies führt zu einem Rückstreuen (*back scattering*) der nun neutralisierten Edelgasionen. Solche rückgestreuten Atome können Energien bis zu mehreren hundert eV besitzen. Sie können nicht mehr über das elektrische Feld in der Sputteranlage gesteuert werden. Wenn sie das Substrat erreichen, können sie

Reaktionen mit der bereits abgeschiedenen Schicht hervorrufen [28]. In diesem Fall können sie wieder zu einem Rücksputtern des Ti von der bereits abgeschiedenen Schicht führen. Weitere Reaktionen wie der Einbau des Edelgases, das Amorphisieren oder das Verdichten der Schicht sind denkbar.

Simulationsergebnisse

Zur Bestätigung der theoretischen Ergebnisse wurden Simulationen mit dem Programm TRIM (*Transport of Ions in Matter*) durchgeführt. Das Programm basiert auf einer *Monte Carlo*-Simulationsmethode. Parameter wie Targetzusammensetzung, Ionenquellen und Energien können frei gewählt werden. Es wurden mittels dieser Parameter Kollisionskaskaden berechnet, deren Ergebnisse, wie z.B. Eindringtiefe der Ionen, gesputterte bzw. rückgestreute Elemente oder Energieverteilungen, graphisch und tabellarisch dargestellt wurden. Es ist zu beachten, dass nur der Beschuss des Targets simuliert wurde und nicht der gesamte Sputterprozess. Alle Berechnungen basierten auf der Randbedingung, dass die Kollisionen im Vakuum stattfanden. Die Simulation mit den Randbedingungen

- Targetmaterial W70Ti30 (At.-%) mit 1000 Å Dicke
- Argon als Ion mit 1 keV Energie und 0° Einfallswinkel
- 10000 simulierte Kollisionen

ergab, dass insgesamt 19,15% der Ar-Ionen, welche auf das Target treffen, rückgestreut werden. Die Energieverteilung dieser rückgestreuten, nun neutralisierten Ar-Ionen ist in Abbildung 5.6 dargestellt. Die Abszisse stellt die Energieverteilung der rückgestreuten Ionen im Verhältnis zur Initialenergie dar. Auf der Ordinate ist die Anzahl der rückgestreuten Atome im Verhältnis zur Gesamtanzahl von Ar⁺-Ionen dargestellt. Ein großer Teil wird mit nur einer geringen Energie von <10% rückgestreut, der höchstwahrscheinlich keine Reaktion auf der Substratoberfläche hervorruft. Allerdings werden circa 14% der gesamten Ar-Ionen rückgestreut, deren Energie > 10% der Initialenergie ist. Dies reicht bis zu 50% der Initialenergie. Es ist davon auszugehen, dass diese Atome genügend energiereich sind, um Veränderungen der Dünnschicht hervorzurufen. Die Simulationsergebnisse bestätigen grundsätzlich die Berechnungen aus der elastischen Kollision, wobei die Ergebnisse der Simulation als deutlich genauer einzuschätzen sind.

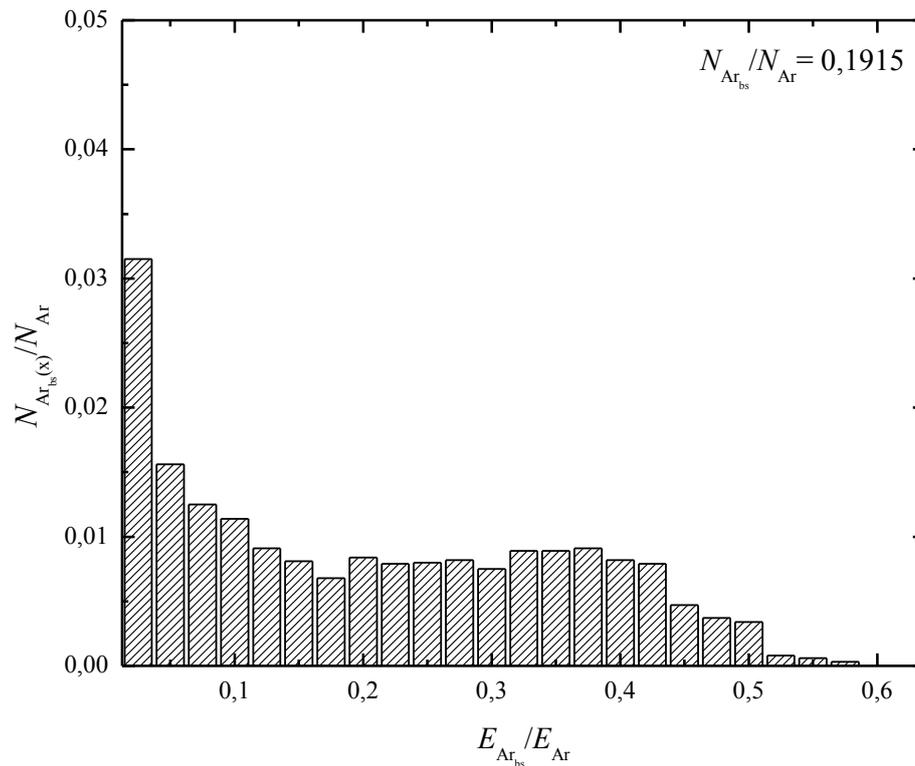


Abbildung 5.6: TRIM-Simulation der Anzahl rückgestreuter Ar-Atome ($N_{Ar_{bs}}$) in Abhängigkeit zu ihrer, relativ zur Initialenergie (E_{Ar}), reflektierten Energie $E_{Ar_{bs}}$.

Experimentelle Ergebnisse

Im nun folgenden Auswerteteil werden die Ergebnisse der Sputterabscheidungen gezeigt, diskutiert und mit den theoretischen und simulativen Ergebnissen verglichen. Die Schichten wurden auf Charakterisierungsscheiben (Kapitel 5.1) abgeschieden und anschließend deren Schichteigenschaften bestimmt. Für die Abscheidung wurden Sputteranlagen im industriellen Maßstab genutzt. Das WTi-Target bestand aus 30 At.-% Ti und 70 At.-% W. Die DC-Sputterleistung der WTi-Abscheidung betrug 2 kW.

Einfluss von Sputterdruck und Bias

Wie in Kapitel 3.1.1 beschrieben, können die Sputterparameter Druck und Bias Einfluss auf Dünnschichteigenschaften nehmen. Bei der Abscheidung der Dünnschicht WTi ist jedoch das Modell von *Thornton* nicht ausreichend, um die Schichteigenschaften zu bestimmen. Wie in den theoretischen Grundlagen und in den Simulationsergebnissen beschrieben, ist mit einem Rückstreuen von Ar-Ionen zu rechnen, wenn Ar als Sputtergas genutzt wird. In Abbildung 5.7 ist die Abhängigkeit des Ti-Gehalts vom Ar-Sputterdruck

und vom additiven Bias aufgezeigt. In keiner der Gruppen wurde die stöchiometrische Targetzusammensetzung erreicht. Bei konstantem Bias aber steigendem Kammerdruck nimmt der Ti-Gehalt der Schicht bis zu einem maximalen Wert von circa 24,5 At.-% Ti zu. Der additive Bias besitzt großen Einfluss auf die Schichtzusammensetzung. Während ohne Bias zwischen 22 und 25 At.-% Ti in der Schicht ist, geht dieser Wert mit einem additiven Bias bis unter 15 At.-% zurück. Dies entspricht einer Differenz von circa 15 At.-% im Vergleich zum Target.

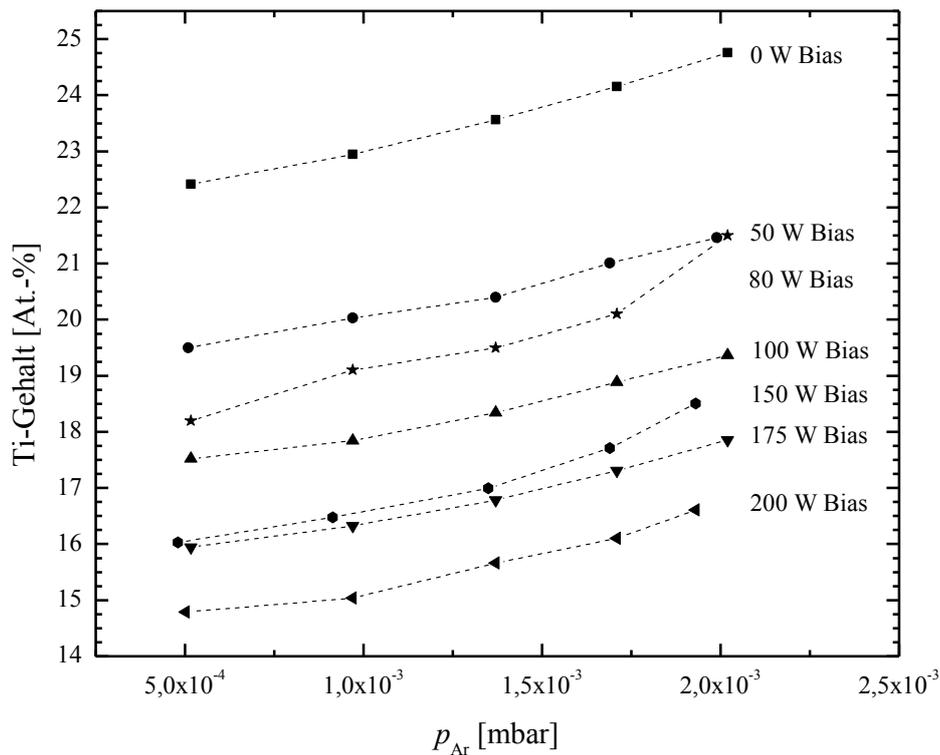


Abbildung 5.7: Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30At.-%Ti/ 70At.-%W).

Ein Grund hierfür ist die bereits erwähnte Rückstreuung von Ar-Ionen am Target aufgrund der hohen Massendifferenz zu W. Infolgedessen kann es zum erneuten Rückspütern von Ti auf der aufwachsenden Dünnschicht kommen. Da ein höherer Sputterdruck in der Prozesskammer eine höhere Teilchendichte mit sich bringt, wird die Kollision mit Atomen in der Transferphase und auch mit rückgestreutem Ar erhöht. Deshalb wird das Rückspütern verringert, was zu einem höheren Ti-Gehalt führt. Das Anlegen einer Bias-Leistung und deren Erhöhung führen zu einem weiteren Rückspütern auf das Substrat, in diesem Fall allerdings mit Ar-Ionen aus dem Plasma. Aufgrund der ähnlichen relativen Atommassen von Ar und Ti wird in beiden Fällen, Rückspütern mit Ar-Ionen und rückgestreutem Ar, präferentiell Ti abgetragen und nicht W. Ein weiterer Hinweis für

diesen Rücksputtereffekt ist in Abbildung 5.8 enthalten. Hier ist der Schichtstress (σ_f) in Abhängigkeit von Sputterdruck und Bias dargestellt. Die negativen Werte des Schichtstress bedeuten, dass es sich um kompressiven Stress handelt. Ohne Bias-Leistung beträgt der kompressive Schichtstress zwischen 0,3 und 1,5 GPa. Bei 50 W Bias-Leistung ist eine Parallelverschiebung zu höheren Stresswerten zu beobachten. Beide Kurven haben gemeinsam, dass sich bei höherem Prozessdruck der Schichtstress verringert. Maßgeblich für den Schichtstress scheint hierbei der Rücksputtereffekt zu sein. Wird das Rücksputtern durch einen höheren Prozessdruck verringert, so vermindert sich auch der Schichtstress. Wird das Rücksputtern zusätzlich durch Bias-Leistung erhöht, so steigt auch der Schichtstress an. Der Grund hierfür ist der sogenannte „*peening effect*“. Wie von Kinbara et al. [28] beschrieben ist, kann Edelgas durch Rücksputtern mehrere hundert eV erreichen und ist somit nicht mehr vom elektrischen Feld kontrollierbar. Es ist auch beschrieben, dass ein solches Rücksputtern eine Reaktion mit der abgeschiedenen Schicht wie etwa ein Zerstören der Kristallschicht hervorruft. Der *peening effect* beschreibt dabei den Einbau von Edelgas in die Schicht, was zu kompressiven Stress führt.

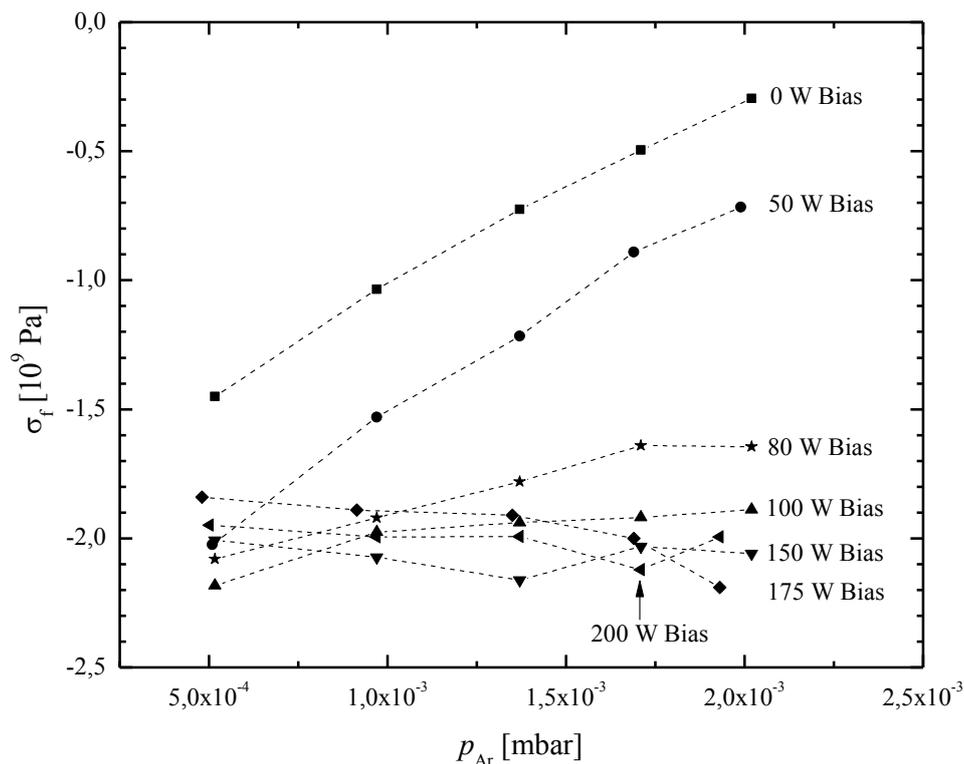


Abbildung 5.8: Schichtstress (σ_f) der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

Des Weiteren ist in Abbildung 5.8 zu erkennen, dass der kompressive Schichtstress ein Maximum erreicht, welches bei circa 1,9 - 2,2 GPa liegt. Geringere Drücke und höhere

Bias-Leistungen können nicht mehr zu einer Erhöhung des Stresses führen. Erklärungen dafür sind, dass kein weiteres Ar mehr eingebaut wird oder die Schicht nicht mehr weiter durch Gitterverzerrungen zu verändern ist. In Abbildung 5.9 ist der Schichtwiderstand (R_{\square}) in Abhängigkeit von Ar-Druck und Bias dargestellt, welche einen weiteren Beweis für den Rücksputtereffekt durch reflektiertes Ar darstellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass der Schichtwiderstand ohne Bias am geringsten ist. Bei höheren Drücken, respektive geringerem Rücksputtern durch rückgestreutes Ar, sinkt der Schichtwiderstand bis auf circa 4,6 Ohm/sq. Von *Hort et al.* [42] wird gezeigt, dass Gitterverzerrungen zu höheren Schichtwiderständen führen. Generell führt das Rücksputtern zu Gitterverzerrungen und/oder Amorphisierungen, welche auch von *Shterenfeld et al.* [68] beschrieben werden. Das steht in gutem Einklang mit den erhöhten Schichtwiderständen infolge geringer Drücke bei 0 W Bias (gestreutes Ar) und mit den hohen Schichtwiderständen bei additivem Bias (Ar-Ionen).

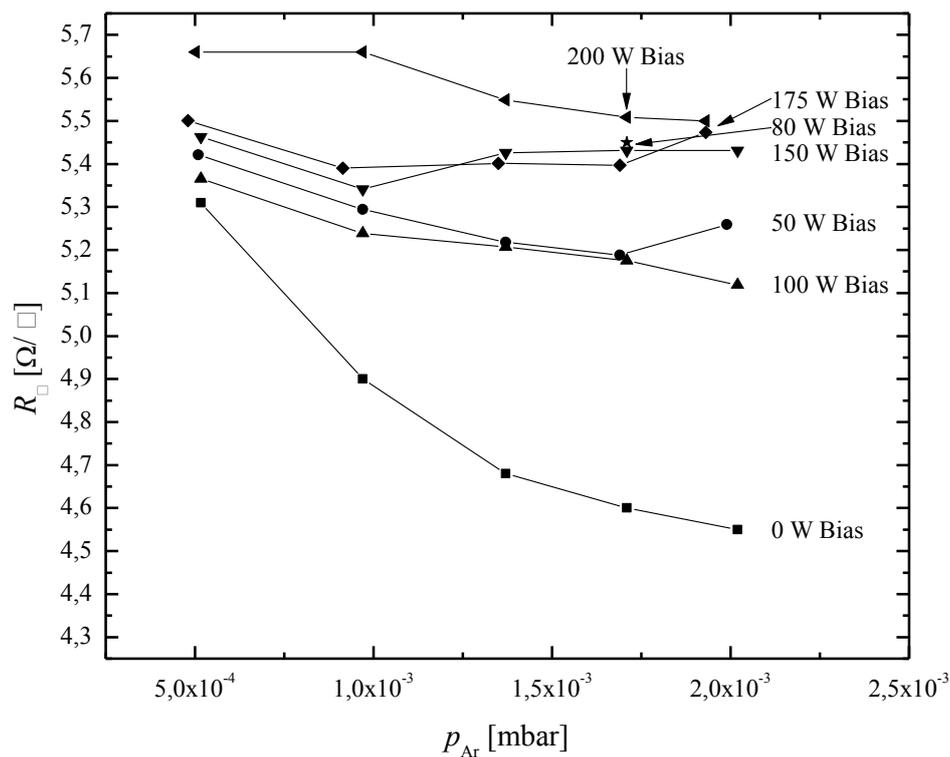


Abbildung 5.9: Schichtwiderstand (R_{\square}) der WTi-Dünnschicht (100 nm) in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

Diese Ergebnisse decken sich mit Untersuchungen von *Bergstrom et al.* [63] und *Shaginyan et al.* [61], welche auch ein Rücksputtern durch gestreutes Ar vermuten. Diese Veröffentlichungen sind jedoch nur mit geringem experimentellem Umfang getätigt worden, sodass nur einzelne Variationen der Prozessparameter zu dieser Schlussfolgerung

fürten. *Shaginyan et al.* zeigen z.B. simulativ, dass die Ti-Abreicherung in der Schicht eine Folge des Rücksputters sein muss, da ein Thermalisieren der W- und Ti-Atome bei höheren Drücken einen vernachlässigbar geringen Einfluss auf die Stöchiometrie hat.

Einfluss des Sputtergases

Wie zuvor beschrieben, hat der Sputterdruck bei der Abscheidung von WTi Einfluss auf dessen Stöchiometrie. Bei höherem Sputterdruck und damit verbundenem reduzierten Rücksputtern durch rückgestreutes Ar erhöht sich der Ti-Gehalt der Schicht. In Kapitel 3.1.1 wurde das *Thornton*-Modell vorgestellt welches besagt, dass sich mit der Änderung des Sputterdrucks auch die Struktur der Schicht ändert. Wenn der Sputterdruck sehr hoch gesetzt wird, z.B. ein 50 bis 100-faches des zuvor beschriebenen Drucks, so ist durch die sehr hohe Kollisionswahrscheinlichkeit des gestreuten Ar in der Prozesskammer ein reduziertes Rücksputtern und dementsprechend ein hoher Ti-Gehalt zu erwarten. Allerdings wird sich die Schichtstruktur zu einem kolumnaren Gebilde verändern, da aufgrund des hohen Drucks weniger Energie zur Oberflächenmigration zur Verfügung steht [23]. Bei Untersuchungen von *Müller* [69] wurde diese Vermutung anhand der Abscheidung von WTi mit circa 0,1 mbar Sputterdruck experimentell bestätigt. Um jedoch die Barriereigenschaften in Abhängigkeit von der Zusammensetzung von WTi zu beurteilen stellt sich die Frage, wie der Ti-Gehalt erhöht werden kann, ohne dass der Prozessdruck angehoben wird. Von *Bergstrom et al.* [63] wurde eine Stöchiometrieänderung von WTi mit dem Wechsel des Sputtergases zu Xenon (Xe) erreicht. Als Begründung wurde die reduzierte Rücksputterrate von Ti auf das Substrat genannt. Um dies zu überprüfen wurden die Berechnungen nach den Gleichungen (5.3)-(5.5) diesmal für Xe als Sputtergas wiederholt, deren Ergebnisse in Tabelle 5.2 zusammengefasst sind. Einerseits sollte sich der Ti-Gehalt aufgrund der Sputterausbeute nicht erhöhen. Verglichen mit den Energieüberträgen auf Ti aus Tabelle 5.1 verringert sich dieser um circa 21%. Andererseits verringert sich die reflektierte Energie erheblich. Aufgrund der verringerten Massendifferenz zu W wird das Edelgas nunmehr zu knapp 3% reflektiert. Dies ist eine Verringerung um 38%. Das von Ti reflektierte Xe wird nach Überlegungen des Massenstoßes seine Energie höchstwahrscheinlich im Target verlieren, da die reflektierte Energie in Richtung der Initialbewegungsrichtung freigesetzt wird.

Tabelle 5.2: Errechnete Werte der Energieüberträge für Ti- und W-Sputtern mit Xe als Sputtergas

	W	Ti
E_2/E_1	0,97	0,78
E_r/E_1	0,03	0,22

Um die Theorie des verringerten Rücksputters zu bestätigen wurden TRIM-Berechnungen analog zu den Sputtersimulationen mit Ar durchgeführt. Lediglich das Sputtergas wurde zu Xe geändert. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.10 dargestellt. Grundsätzlich werden nur circa 5% der gesamten Xe-Ionen rückgestreut. Davon wiederum erreicht kein Xe-Ion über 10% der Initialenergie. Vielmehr besitzt der Großteil der rückgestreuten Ionen eine Energie von $< 2,5\%$ der Initialenergie. Bei Betrachtung diesen Wertes ist fraglich, ob die rückgestreuten Atome zu einem Rücksputtern auf dem Substrat führen können. Die Ergebnisse der Simulation bestätigen die Überschlagsberechnungen nach dem Massenstoßprinzip.

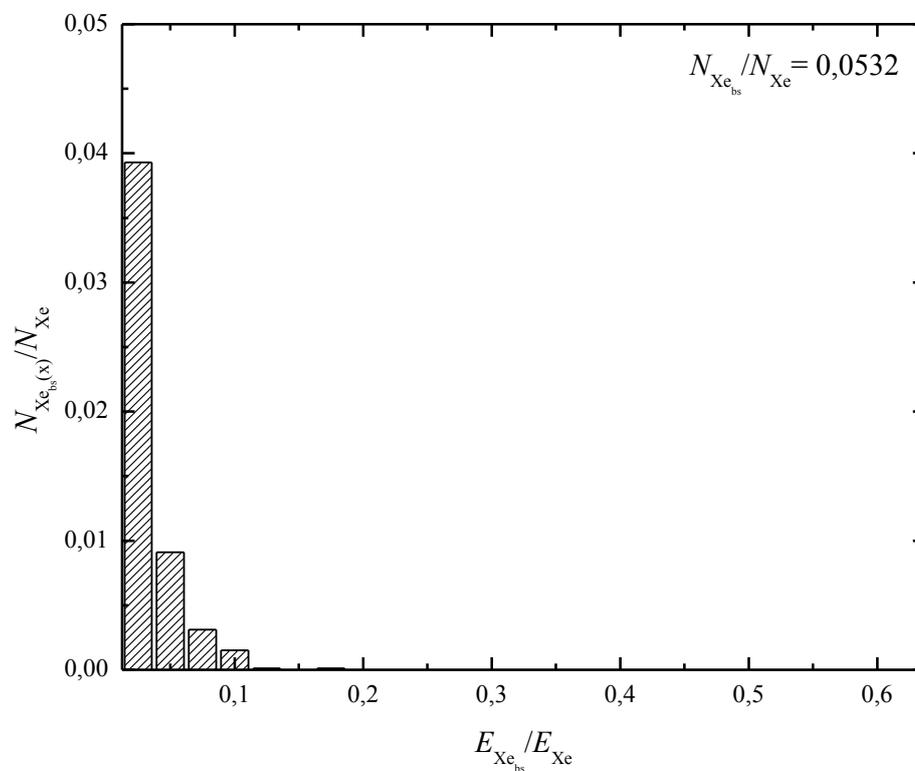


Abbildung 5.10: TRIM-Simulation der Anzahl der rückgestreuten Xe-Atome ($N_{Xe_{bs}}$) in Abhängigkeit von ihrer, relativ zur Initialenergie (E_{Xe}), reflektierten Energie ($E_{Xe_{bs}}$).

Die Berechnungen und Simulationen bestätigen, dass der Wechsel zu einem schwereren Edelgas ein Mittel sein kann, um das Rücksputtern von Ti zu verhindern und somit den Gehalt an Ti in WTi zu erhöhen. Für diesbezügliche Versuche wurde der Prozessdruck konstant gehalten. Bei Verwendung von schwereren Gasen ist dafür der Gaszufluss zu verringern. In Abbildung 5.11 ist der Ti-Gehalt in Abhängigkeit vom Edelgas bei nahezu gleichem Prozessdruck aufgezeigt. Zusätzlich zu den Berechnungen und der Simulation wurde auch das Edelgas Krypton (Kr) mit einer relativen Atommasse von 83,80 u, welche zwischen denen von Ar (39,94 u) und Xe (131,29 u) liegt, experimentell bewertet. Es ist zu

erkennen, dass der Ti-Gehalt in WTi zu schwereren Gasen hin steigt, obwohl der Energieübertrag aufgrund der höher werdenden Massendifferenz sinkt. Dies kann im Falle des Xe fast bis zur Targetstöchiometrie von 30 At.-% Ti gehen. Die Erklärung hierfür ist die Reduzierung des Rücksputters von Ti mit rückgestreuten Edelgasionen vom Substrat. Zu schwereren Gasen hin werden die Edelgasionen weniger und energieärmer rückgestreut, was zu einem Herabsetzen der Reaktion mit der Dünnschicht führt.

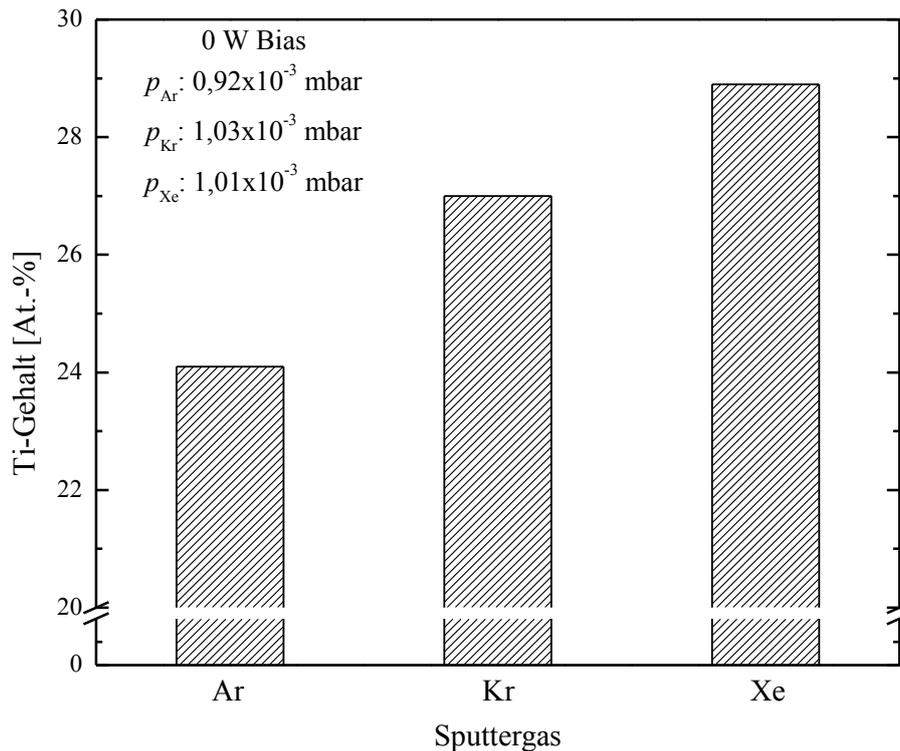


Abbildung 5.11: Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Edelgas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/70 At.-% W).

Eine weitere Bestätigung für dieses Verhalten ist in Abbildung 5.12 gezeigt. Die Substrattemperatur während der Abscheidung wurde mit einem anlageinternen Pyrometer gemessen. Die Temperatur, die sich dabei im Gleichgewicht einstellt, ist in Abbildung 5.12 dargestellt. Die Temperatur während der Abscheidung nimmt im Fall der schweren Edelgase ab, obwohl die Abscheiderate (nicht dargestellt) leicht zunimmt. Dies ist ein Hinweis auf die reduzierte Reaktion durch Rückspattern auf dem Substrat. Die Erwärmung des Substrats erfolgt vorwiegend aus der Kondensationswärme, der kinetischen Energie der Metallatome und der Energie der reflektierten Edelgasionen, die auf das Substrat treffen. Da bei den schwereren Gasen die Kondensationswärme und die kinetische Energie gleich bleiben oder sich nur leicht erhöhen (erhöhte Abscheiderate) ist die Differenz eine Folge aus dem reduzierten Rückspattern auf dem Substrat. In Abbildung 5.13 ist der

Schichtstress in Abhängigkeit des Sputtergases dargestellt. Der kompressive Schichtstress nimmt bei schwereren Edelgasen ab und wird bei Xe sogar tensil. TEM-Analysen (Kapitel 5.3.2) zeigen, dass sich die Mikrostruktur nicht verändert hat, welches in gutem Einklang zu den Ergebnissen von *Bergstrom et al.* [63] steht. Der Grund für den Stressabbau bis hin zur Stressumkehr kann der *peening effect* sein, der unter Verwendung von schwereren Gasen nicht mehr stattfindet.

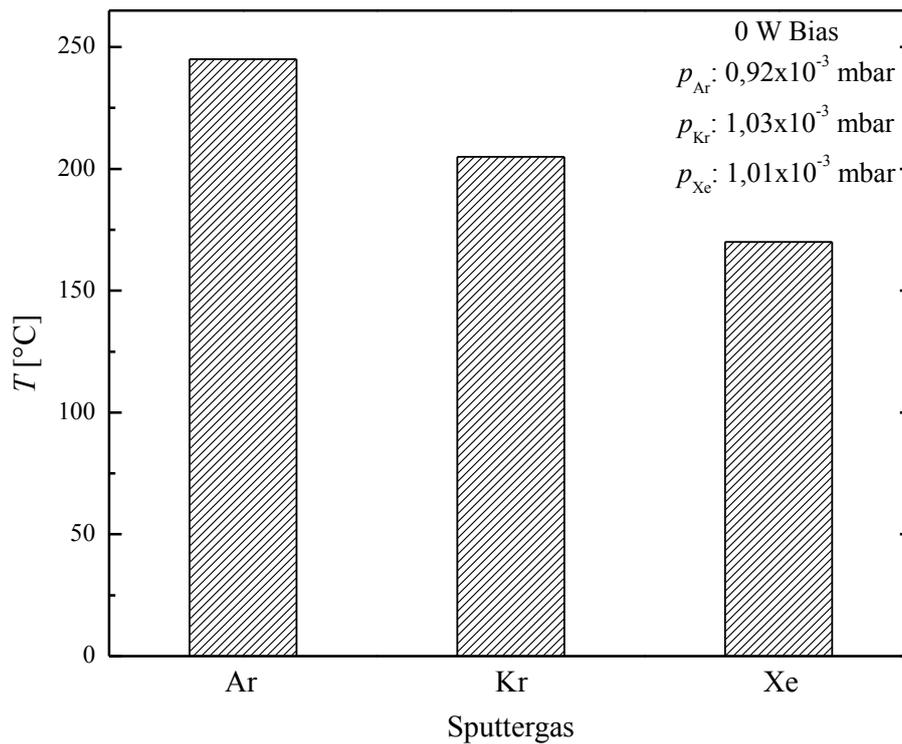


Abbildung 5.12: Pyrometrisch ermittelte Temperatur während der Abscheidung von WTi in Abhängigkeit vom Sputtergas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

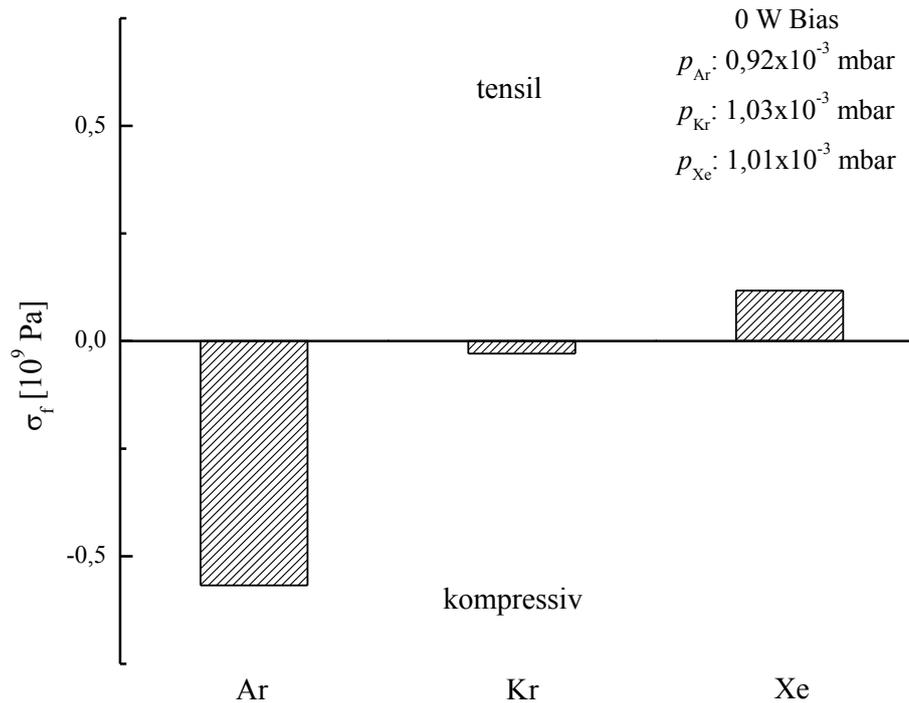


Abbildung 5.13: Schichtstress (σ_f) von WTi in Abhängigkeit vom Sputtergas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/70 At.-% W).

Einfluss von reaktivem Sputtern mit N_2

Wie bereits erwähnt kann die Sputterabscheidung auch mit einem reaktiven Gas erfolgen. In diesem Fall wurde die WTi-Dünnschicht, aufgrund erhöhter Barrierendichtigkeiten (Kapitel 5.5.4) mit Stickstoff (N_2) als Reaktionspartner abgeschieden. Es stellt sich die Frage, zu welchen Anteilen N_2 bezogen auf das Edelgas in die Prozesskammer eingebracht wird. In der folgenden Beschreibung wird vom partiellen Verhältnis gesprochen, welches ausdrückt, wie viel N_2 verglichen mit der Gesamtmenge an Gas eingebracht wird. Wird also N_2 im gleichen Verhältnis (1:1) zu Ar eingebracht, so entspricht dies einem Partialfluss von 0,5. Nitridierte Dünnschichten zeigen bezogen auf die nicht nitridierten Komplementäre eine reduzierte Leitfähigkeit [48]. Dies gilt auch für WTi. In Abbildung 5.14 ist der Zusammenhang von Partialfluss und Schichtwiderstand für den Fall der WTi-Abscheidung mit Ar als Edelgas, ohne Bias und mit nahezu konstantem Prozessdruck dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass mit zunehmendem N_2 -Anteil auch der Schichtwiderstand zunimmt. Bei 33% N_2 -Anteil verdreifacht sich der Schichtwiderstand. In weiteren Versuchen wurde festgestellt, dass sich dieser Wert noch weiter erhöht. Aufgrund der Anwendung und der Notwendigkeit der ohmschen Kontaktierung auf p- und n-dotierten Gebieten wurde der Bereich über dem Partialfluss von 0,33 nicht weiter

betrachtet. Die Auswertungen in Kapitel 5.6.4 zeigen, dass bezogen auf den Kontaktwiderstand ein Partialfluss von 0,33, noch anwendbar ist.

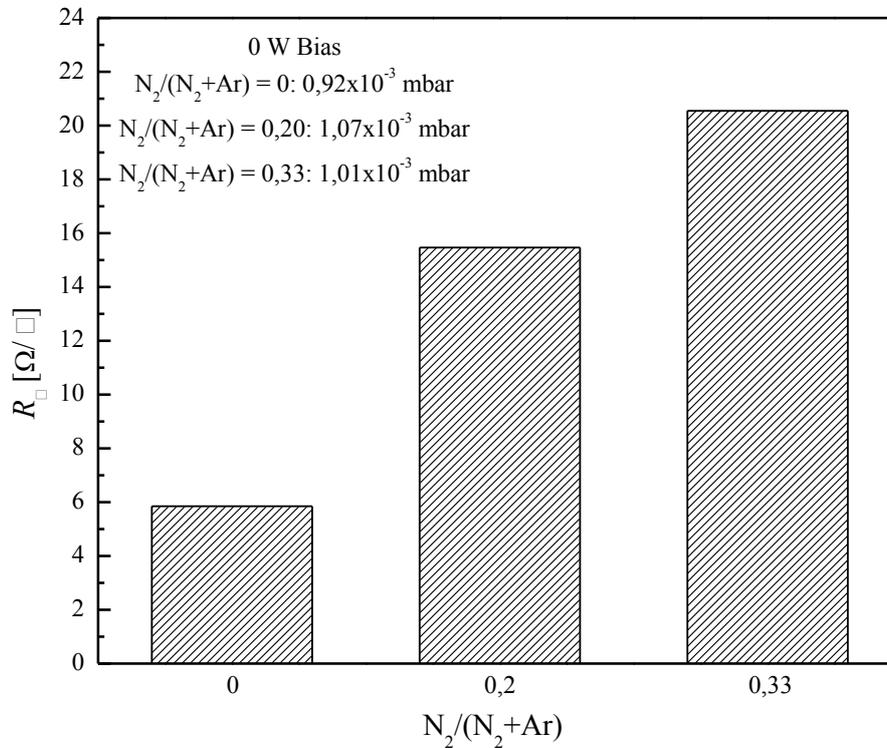


Abbildung 5.14: Schichtwiderstand (R_{\square}) der WTi-Dünnschicht (100 nm Dicke) in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

Neben der Leitfähigkeit verändert sich auch der Schichtstress von WTi:N₂. In Abbildung 5.15 ist der Schichtstress in Abhängigkeit vom Partialfluss zwischen 0 bis 0,33 dargestellt. Der Stress der Schicht nimmt stark zu, was auf den Einbau von N₂ oder N₂-Verbindungen zurückzuführen ist. Werte über 4 GPa, wie sie die Gruppe des Partialflusses mit 0,33 zeigen, sind schwierig in der Integration auf Halbleiterebene. Es können Delaminationen (Kapitel 5.6.2) und/oder erhöhte Waferkrümmungen die Folge sein. Die einzige Gegenmaßnahme liegt darin die Schicht so dünn wie möglich abzuscheiden. Die erhöhten Stresswerte sind jedoch, anders als bei Abscheidung mit reinem Ar, keine Folge von eingebautem Ar oder Reaktionen mit der Dünnschicht. Das bestätigt unter anderem Abbildung 5.16, in welcher der Ti-Gehalt in Abhängigkeit des Partialflusses dargestellt ist. Bei Zusatz von N₂ als reaktive Komponente steigt der Ti-Gehalt an, wobei davon auszugehen ist, dass es sich in diesem Fall ganz oder teilweise auch um Titanitrid (TiN) handeln könnte. Die Unterscheidung ist durch die RFA-Messung nicht möglich, es wird jedoch im Weiteren mit zusätzlichen Analysen gezeigt, dass sich unter anderem TiN bildet. Die Bildung dieses TiN ist die Erklärung für das reduzierte Rücksputtern. Das gestreute Ar

kann weniger Ti/TiN rücksputtern, je mehr N_2 zur Verfügung steht und je mehr TiN sich bildet. Die Verbindung scheint unempfindlicher gegenüber dem Rücksputtern zu sein. Im Folgenden wird zusätzlich gezeigt, dass sich ein sehr feinkristalliner Mischkristall mit TiN als Bestandteil bildet. Bestätigt wird diese Vermutung vom reaktiven Sputtern des WTi: N_2 mit additivem Bias. Der Bias hat hierbei nahezu keinen Einfluss auf die Parameter Schichtstress, Ti-Gehalt und Widerstand. Dies steht im Gegensatz zu den bereits gezeigten Ergebnissen ohne N_2 als reaktives Gas und bedeutet, dass selbst eine zusätzliche Beschleunigung auf das Substrat kein oder ein nur stark reduziertes Rücksputtern des Ti und TiN hervorruft. Außerdem hat sich gezeigt, dass die Schichtdickenhomogenität über den Wafer hinweg bei reaktivem Sputtern deutlich verbessert wird. Dies ist ein weiterer Hinweis auf das reduzierte Rücksputtern. Das Rücksputtern per se führt, wie schon beschrieben, zu einer Reaktion mit dem Substrat. Diese Reaktion kann nicht auf dem ganzen Wafer gleichmäßig stattfinden, was zu einer reduzierten Schichtdickenhomogenität führt. Wird dieses Rücksputtern nun durch die Verwendung eines reaktiven Gases reduziert, so verringert sich auch die Standardabweichung der Schichtdicke über einen Wafer. Die Ergebnisse der Schichtzusammensetzung und des Stresses decken sich mit den Beobachtungen aus den Veröffentlichungen von *Shaginyan et al.* [62] und *Raaijmakers et al.* [70], in welchen teilweise die Abscheidung von WTi in Kombination mit N_2 als reaktive Komponente untersucht wurde.

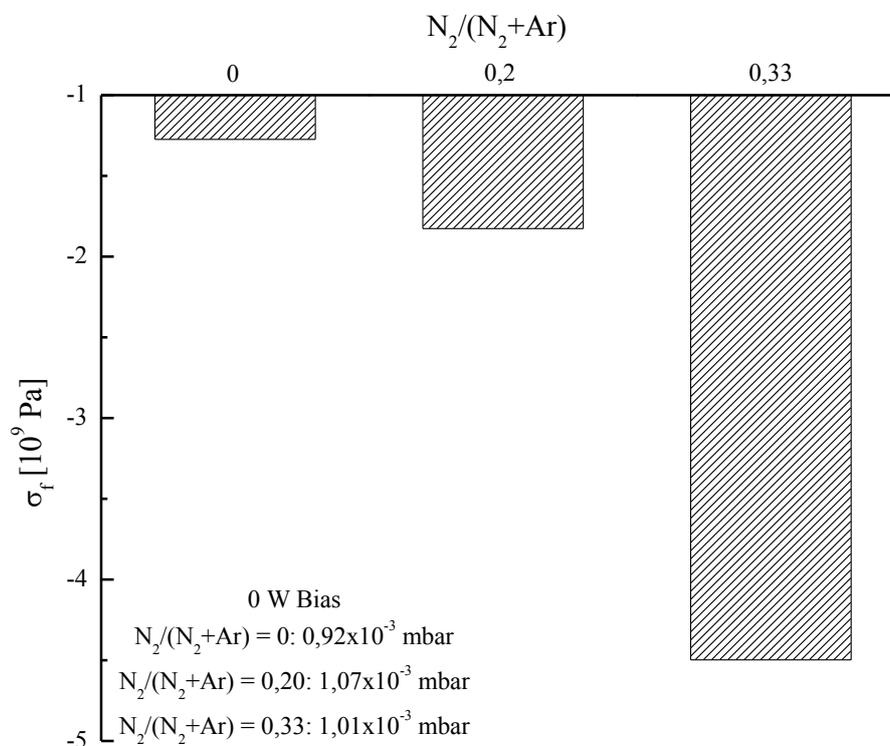


Abbildung 5.15: Schichtstress (σ_f) der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

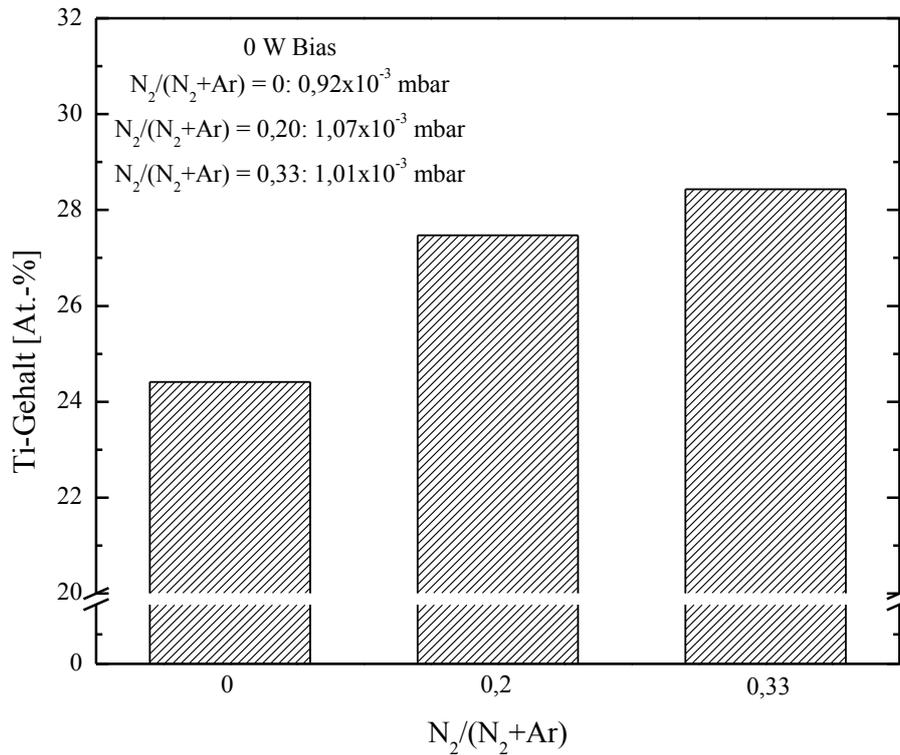


Abbildung 5.16: Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).

Anhand der gezeigten Ergebnisse wurden signifikante Prozessmodi ausgewählt, welche sowohl auf Barrierentestscheiben als auch auf Produktebene integriert wurden. In erster Instanz wurden die Barriereigenschaften gegenüber Diffusion bewertet (Kapitel 5.5). Die Integration auf Produktebene (Kapitel 5.5.5) geschah mit erfolgsversprechenden und akademisch sinnvollen Barrierschichten. In Tabelle 5.3 sind die hergestellten Probengruppen mit WTi als Diffusionsbarriere zusammengefasst aufgelistet.

Tabelle 5.3: Übersicht und Kategorisierung der Probenherstellung von WTi-Testwafern

			Partial- fluss	p [10 ⁻³ mbar]	Bias [W]	σ_r [10 ⁹ Pa]	R_{\square} [Ω/\square]	Ti [At.-%]	Barriere- test scheiben	Demon- strator
WTi	Abscheidung ohne N ₂	Ar	/	1,5	0	-0,7	4,6	23,5	X	
			/	1,0	80	-1,9	5,4	19,0	X	X
		Kr	/	1,0	0	-0,1	4,1	27,0	X	
		Xe	/	1,0	0	+0,2	4,0	29,0	X	
	Abscheidung reaktiv mit N ₂	Ar	0,2	1,0	0	-1,8	15,4	27,4	X	X
			0,33	1,0	0	-4,4	20,5	28,3	X	X
		Kr	0,2	1,0	0	-	11,1	26,7	X	
			0,33	1,0	0	-	15,0	26,1	X	
		Xe	0,2	1,0	0	-	8,3	27,9	X	
			0,33	1,0	0	-	11,6	27,7	X	

5.3.2 Untersuchung der Mikrostruktur

In diesem Kapitel soll die Mikrostruktur von WTi-Dünnschichten erläutert werden. Wie im vorigen Kapitel beschrieben, entstehen je nach gewählten Prozessparametern unterschiedliche WTi-Dünnschichten. Der Unterschied dieser Schichten wird in den Parametern Schichtstress, Stöchiometrie und Widerstand sichtbar und soll in diesem Kapitel anhand des Gefüges überprüft werden. Die Priorität liegt dabei auf den WTi-Dünnschichten und ihren Prozessparametern, die im Folgenden gute Barriereigenschaften gegenüber Al/Si-Diffusion zeigen. Um zusätzlich den Zusammenhang zwischen schlechten Barriereigenschaften und der Mikrostruktur zu erhalten wurden auch weitere Prozessparameter für WTi-Dünnschichten bezüglich ihres Gefüges untersucht.

WTi, Ar als Sputtergas, kein N₂, 1x10⁻³ mbar Sputterdruck, 80 W Bias

Die mit Ar gesputterte WTi-Dünnschicht wird im Folgenden als Standard festgelegt, da sie vergleichsweise einfach umzusetzen ist. Diese Schicht wurde mit Hilfe von Prozessvariationen verändert und bezüglich der Barrierenwirkung getestet. Es wird Ar als Sputtergas verwendet, welches verglichen mit Kr und Xe günstiger ist und industriell oft angewendet wird. Aufgrund des *Thornton*-Modells ist ersichtlich, dass geringe Sputterdrücke zu einer dichten Mikrostruktur mit kleinen Körnern führen. Diese

Eigenschaft wirkt sich positiv auf die Barrierenwirkung der Dünnschicht aus (Kapitel 4.1). Der Prozessdruck muss jedoch auch industriell umsetzbar und wirtschaftlich sein. Ein Prozessdruck von circa 1×10^{-3} mbar ist von Pumpen in industriellen Sputteranlagen problemlos realisierbar und ermöglicht wirtschaftliche Prozesszeiten. Der Einsatz des Bias wurde gewählt, um den Ti-Gehalt möglichst gering zu halten, da ein niedriger Ti-Gehalt einen positiven Einfluss auf die Barrierenwirkung hat (Kapitel 5.5.3).

In Abbildung 5.17 sind elektronenmikroskopische Aufnahmen einer WTi-Dünnschicht dargestellt. Beide Analysen zeigen eine dichte Schicht, dessen Gefügestruktur unterhalb der Auflösungsgrenze liegt. Es sind keine Körner oder Korngrenzen erkennbar. Abbildung 5.17.a zeigt die REM-Aufnahme. Als Vorpräparation wurde der besputterte Wafer gebrochen. Die Bruchkante ist aufgrund der Vorzugsrichtung des Si-Kristalls eindeutig definiert. Die Bruchkante des WTi ist verglichen mit dem geraden Bruch des Si sehr rau. Es lässt sich an der WTi-Bruchkante eine vertikale Struktur erkennen, welche mit der erwarteten Struktur nach dem *Thornton*-Modell übereinstimmt. Das Brechen im WTi findet an den Flächen zwischen den einzelnen Kristallen statt. Hierdurch werden die Wachstumsrichtungen herausgestellt, welche typisch für eine gesputterte Dünnschicht mit einem oder mehreren hochschmelzenden Elementen sind. Aufgrund der zum Substrat gerichteten Bewegung der auftreffenden Atome bzw. der geringen homologen Temperatur und der damit verbundenen herabgesetzten Oberflächen- und Volumendiffusion findet ein vertikal gerichtetes Wachstum an den Keimstellen statt. Je nach Temperatur- und Sputterdruck sind diese Kristalle faser-, dendriten- oder kolumnarförmig (Kapitel 3.1.1). Für den dargestellten Fall der WTi-Abscheidung lässt die Bruchkante vermuten, dass es sich um eine Abscheidung in Zone T bis 2 des *Thornton*-Modells handelt. Die Struktur ist feinkörnig, besitzt eine hohe Packungsdichte und eine geringe Oberflächenrauigkeit.

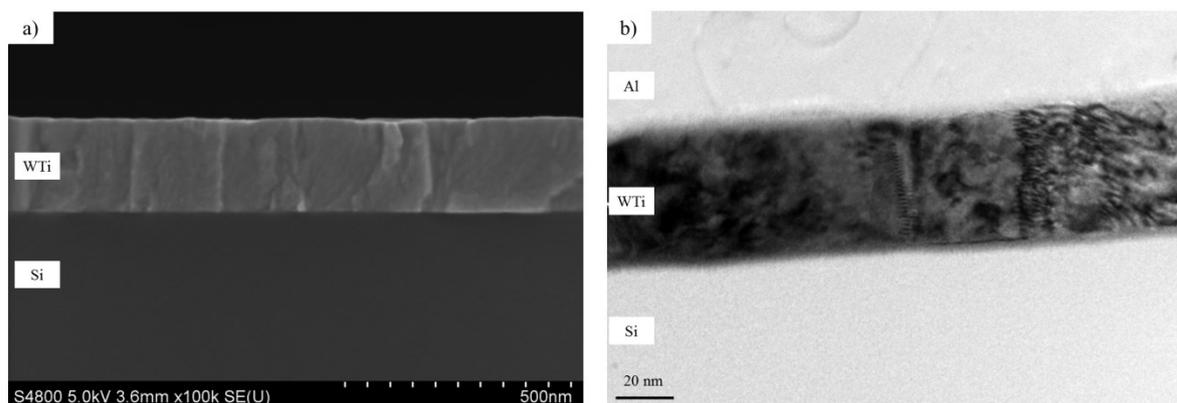


Abbildung 5.17: a) REM-Aufnahme einer WTi-Dünnschicht (200 nm) auf Si-Substrat, b) Aufnahme einer TEM-Lamelle von Al (1000 nm)/WTi (50 nm) auf Si-Substrat.

In Abbildung 5.17.b ist eine TEM-Aufnahme der WTi-Dünnschicht zwischen Al und Si dargestellt. Eine dendritische Struktur ist nicht zu erkennen. W, das in der Schicht der

Hauptbestandteil ist, lässt die Schicht aufgrund der hohen Atommasse dunkel wirken. Die TEM-Lamelle ist allerdings nicht optimal dünn, sodass das Gefüge nicht gut dargestellt werden kann. Dies resultiert vor allem durch die unterschiedliche Abtragsrate von Al und Si verglichen mit WTi beim FIB-Dünnen. Auf der rechten Seite der TEM-Lamelle sind das Al und das Si nahezu nicht mehr vorhanden und die WTi-Schicht ist besser durchstrahlbar. An dieser Stelle lässt sich untergeordnet zu dem dendritischen Wachstum eine Polykristallinität erahnen. In Abbildung 5.18 ist eine REM-Aufnahme einer 300 nm dicken WTi-Dünnschicht gezeigt, welche trockenchemisch strukturiert wurde. In dieser Abbildung ist die faserförmige und dichtgepackte Struktur des WTi erkennbar. Diese Art der Struktur deckt sich mit den Ergebnissen von *Palmstrom* et al. in der sie als lamellenartig bezeichnet wurde [71]. Die Auflösung in dieser Abbildung reicht jedoch nicht aus, um die Kornstrukturen in den jeweiligen Fasern zu identifizieren. Eine spezielle TEM-Analyse in Abbildung 5.22 gibt jedoch darüber Aufschluss.

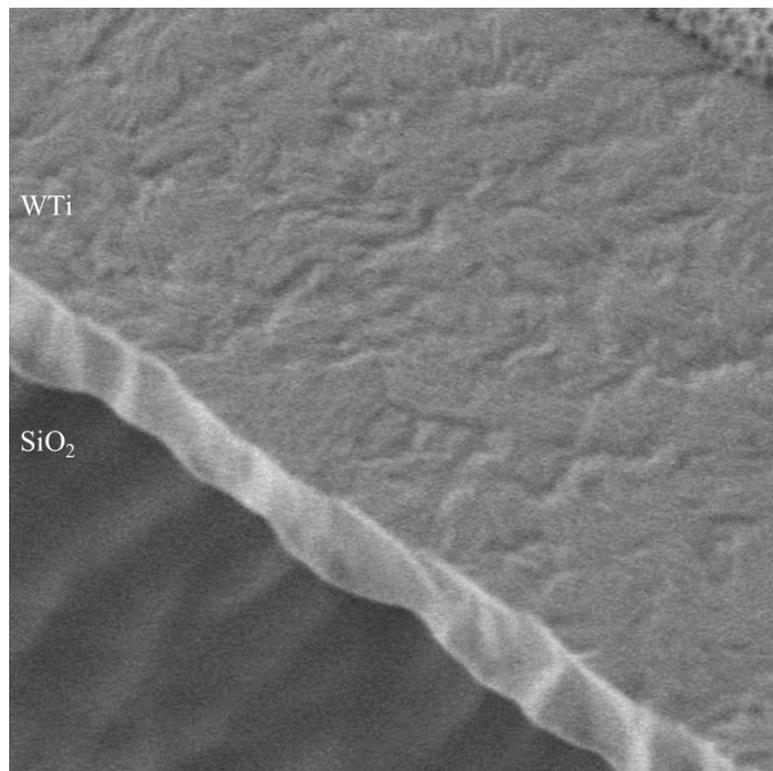


Abbildung 5.18: REM-Aufsicht auf eine 300 nm dicke, trockenchemisch strukturierte WTi-Dünnschicht auf SiO₂.

Um genauere Informationen über das Maß der Kristallinität, Kristallgröße und Struktur zu erhalten wurde eine XRD-Untersuchung an WTi durchgeführt. In Abbildung 5.19 ist das Röntgendiffraktionsspektrum von einer WTi-Dünnschicht gezeigt. Als Strahlung wurde die Cu-K_α Linie mit einer Wellenlänge von $\lambda_1=1,5406 \text{ \AA}$ und $\lambda_2=1,5444 \text{ \AA}$ gewählt. Neben den Reflexen, welche von dem Si-Kristall kommen, ist ein einzelner Peak bei $39,9^\circ$ zu erkennen, der W (110) repräsentiert. Typischerweise befindet sich der Peak von W (100)

bei $40,34^\circ$. Die geringfügige Veränderung zum kleineren Winkel kann eine Folge einer größeren Elementarzelle sein. Die Struktur des Kristallgitters ist kubisch raumzentriert (bcc). Diese Vermutung wird auch dadurch bestätigt, dass keine Reflexion von Ti zu erkennen ist. Die größere Elementarzelle ist in diesem Fall eine Folge der Präsenz von Ti, welches mit W einen Mischkristall bildet. Weitere Bestätigungen dafür werden im Folgenden mit Hilfe von TEM-Analysen und der Auger-Spektroskopie gegeben. Außerdem ist erkennbar, dass es sich nur um einen einzelnen Peak handelt. Dieses Ergebnis lässt die Vermutung zu, dass WTi epitaktisch auf dem Si aufgewachsen ist. Dies steht nicht im Widerspruch mit einer Polykristallinität, da die Kristallstrukturen in den Körnern mikrostrukturell gleich ausgerichtet sein können. Das Spektrum von WTi steht in gutem Zusammenhang mit den Ergebnissen aus weiteren Veröffentlichungen in denen auch eine bcc-Struktur erkannt wurde [62] [70] [72]. Die Kristallitgröße wurde mit Hilfe von Gleichung (3.4) abgeschätzt. Die gemessenen und die daraus resultierenden Werte für die Kristallgröße sind in Tabelle 5.4 aufgeführt. Die Korngröße von circa 20 nm steht in gutem Zusammenhang zu Untersuchungen von *Qingxiang et al.* [56], in denen neben einer ähnlichen Kristallitgröße auch einen Hinweis auf einen Mischkristall festgestellt wurde. Allerdings konnte dieser Hinweis nicht näher bestätigt werden.

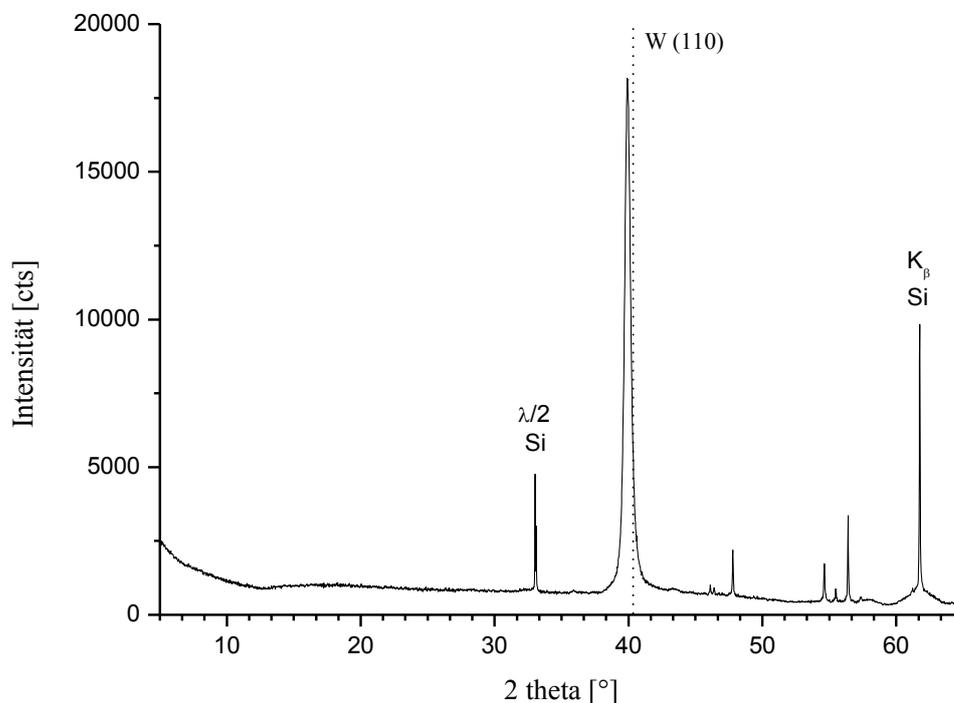


Abbildung 5.19: Röntgendiffraktionsspektrum von WTi (100 nm) auf Si-Substrat (100).

Um die Bildung eines Mischkristalls zu prüfen wurde eine Auger-Elektronenspektroskopie durchgeführt. Aufgrund der hohen Nachweisgrenze von 0,1 At.-% und der Möglichkeit eines Elementmappings im nm-Bereich besteht die Möglichkeit auftretende Ti-Segregation

erkennen zu können. Das Ergebnis des Elementmappings ist in Abbildung 5.20 dargestellt. Es wurde in beiden Fällen die gleiche Fläche analysiert, was auch in den dunklen Bereichen sichtbar ist. Hierbei handelt es sich um Zinn-Partikel (Sn), die als Orientierungshilfe dienen. Die Auflösung ist durch die Pixelgröße auf 15 nm reglementiert. Abgesehen von den dunklen Sn-Bereichen fällt auf, dass sowohl W als auch Ti gleichmäßig verteilt sind. Es tritt keinerlei Segregation auf. Die jeweiligen Spektren, welche pro Pixel aufgenommen werden bestätigen dies auch. Ti- und W-Level sind in den einzelnen Pixelspektren vergleichbar. Würde sich Ti nur an Korngrenzen anlagern und keinen Mischkristall bilden, so müsste das Ti-Signal an den Stellen wo ein W-Korn untersucht wird zu Null tendieren und ein weißer Pixel im Ti-Map sichtbar werden. Dies ist nicht der Fall, sodass eine gleichmäßige Verteilung der Elemente W und Ti in Form eines Mischkristalls anzunehmen ist. Das Ergebnis der Auger-Elektronenspektroskopie bestätigt somit das XRD-Ergebnis. Im Folgenden wird zusätzlich anhand von TEM-Ergebnissen gezeigt, dass eine Segregation von Ti auch in einem Auflösungsbereich < 15 nm nicht zu erkennen ist.

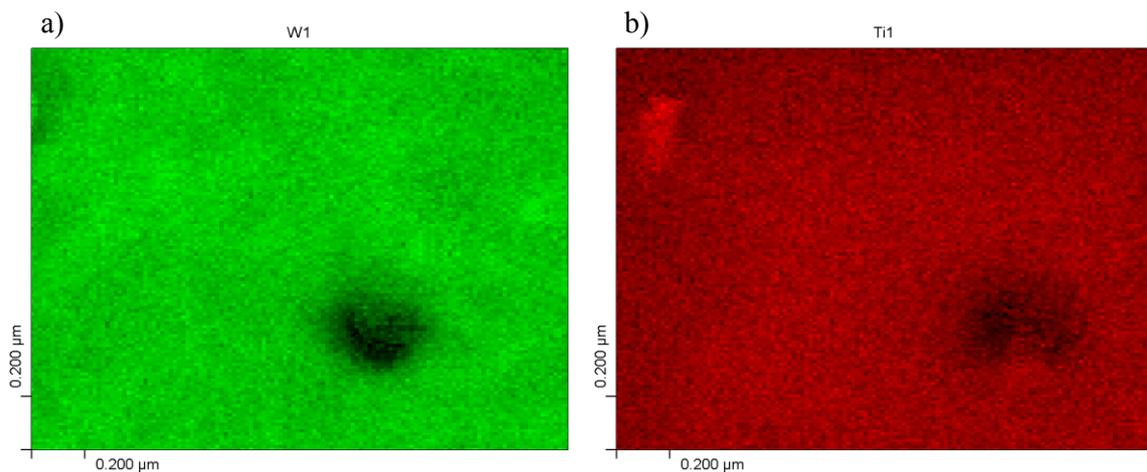


Abbildung 5.20: Auger-Elementmapping von a) W und b) Ti an WTi-Oberfläche.

Einfluss von reaktivem Sputtern mit N_2

Wie bereits in Kapitel 5.3.1 gezeigt hat das reaktive Sputtern mit N_2 einen großen Einfluss auf die WTi-Dünnschicht. Diese Prozessvariation hat zusätzlich einen positiven Einfluss auf die Barrierenstabilität (Kapitel 5.5.4). Im Nachfolgenden wird die WTiN-Dünnschicht beschrieben, die mit einem Partialfluss von 0,33 hergestellt wurde.

In Abbildung 5.21 ist das Röntgendiffraktionsspektrum von WTiN gezeigt. Als Strahlung wurde erneut die Cu- K_α Linie mit einer Wellenlänge von $\lambda_1=1,5406$ Å und $\lambda_2=1,5444$ Å gewählt. Es ist ebenso ein einzelner Peak zu erkennen, der in diesem Fall allerdings bei $42,4^\circ$ liegt. Dieser Wert kann entweder zu TiN (200) bei $42,42^\circ$ oder WN (100) bei $41,87^\circ$ zugeordnet werden. Da diese beiden Phasen nicht eindeutig zu unterscheiden sind lässt das

die Vermutung zu, dass eine Mischphase aus WN und TiN vorliegt. Im Vergleich zu Abbildung 5.19 ist der W-Peak komplett verschwunden, sodass W vollständig zu WN reagiert ist. Die Kristallstruktur ist kubisch flächenzentriert (fcc) was in gutem Einklang zu der Untersuchung von *Raaijmakers* et al. steht [70], in der eine Änderung vom bcc- zum fcc- Kristallgitter beobachtet wurde sobald der Partialfluss den Wert von 0,1 überstieg.

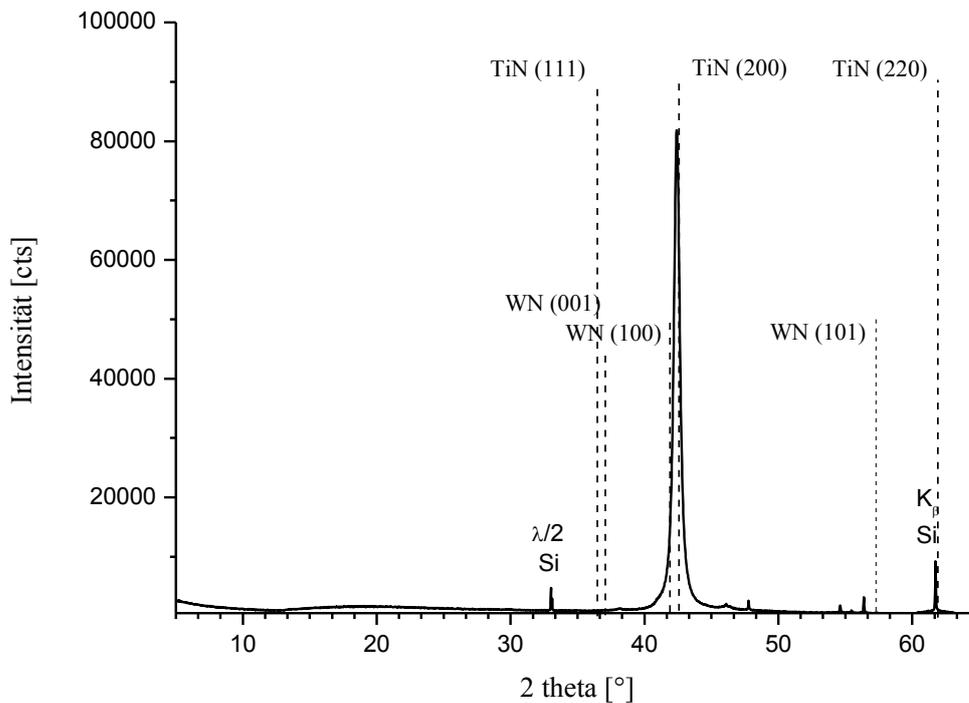


Abbildung 5.21: Röntgendiffraktionsspektrum von WTiN (100 nm dick, gesputtert mit Partialfluss 0,33) auf Si-Substrat (100).

Tabelle 5.4: Vergleich der gemessenen und berechneten Werte der Kristallgröße für WTi und WTiN anhand der Röntgendiffraktionspektren aus Abbildung 5.19 und Abbildung 5.21

	$\lambda=1,54 \text{ \AA}, K=1,$	
	WTi	WTiN
Peak	W (110)	TiN (200)/ WN (100)
2 Theta [°]	39,9	42,4
Halbwertsbreite [rad]	0,00958	0,00953
Kristallgröße [nm]	20,962	21,868

Wie zuvor für WTi beschrieben wurde auch für WTiN die Kristallgröße nach der *Scherrer*-Gleichung an der Breite des Peaks abgeschätzt. Die gemessenen und daraus berechneten Werte sind in Tabelle 5.4 aufgeführt. Die abgeschätzte Korngröße ändert sich

im Vergleich zu WTi nur kaum. Die Kristallgröße ist oberhalb des ermittelten Wertebereichs aus der Ausarbeitung von *Raaijmakers* et al. [70] entnommen. Weiterhin differiert dieser Wert deutlich von den ermittelten Werten aus den folgenden TEM-Untersuchungen, die in Abbildung 5.22 dargestellt sind.

In Abbildung 5.22 ist die TEM-Aufnahme von WTiN dargestellt. Wie zuvor beschrieben stellt sich eine TEM-Untersuchung an WTi oder WTiN zwischen Si und Al als komplex dar. In dieser Untersuchung wurde neben der Ionendünnung zusätzlich ein *Ar-Milling* auf der TEM-Lamelle durchgeführt. An den Randstellen des Dünnungsstrahls wird die WTiN-Dünnschicht auf unter 10 nm gedünnt und somit sehr gut analysierbar.

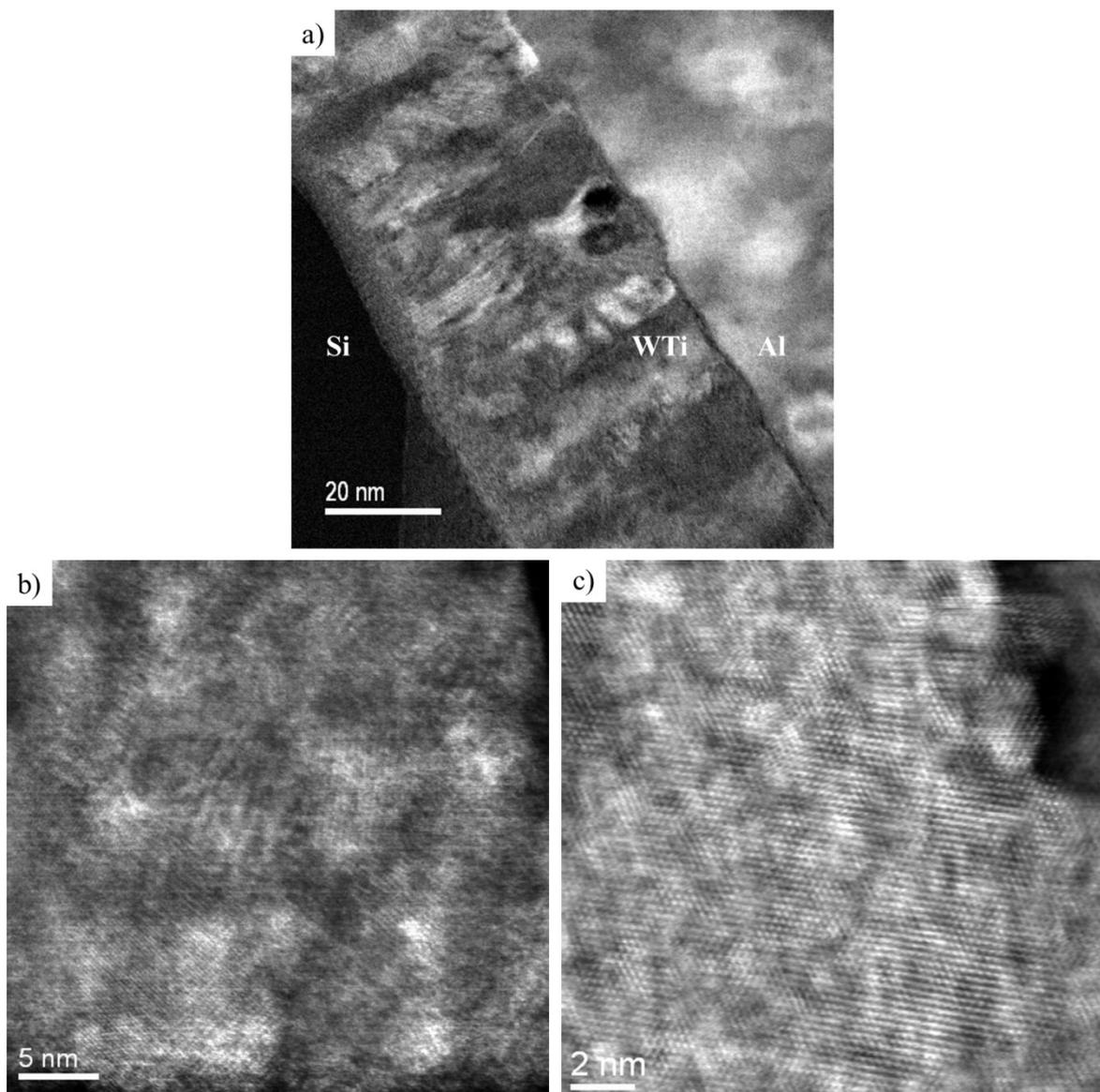


Abbildung 5.22: TEM-Analysen an WTiN auf Si (100) unter Al. a) HRSTEM-Aufnahme DF- Detektor, b) vergrößerte HRSTEM-Aufnahme im DF-Detektor und c) HRSTEM-Aufnahme mit HAADF-Detektor.

In Abbildung 5.22.a ist die sputterbedingte kolumnare Struktur ersichtlich. Diese Struktur hat aber auch eine untergeordnete polykristalline Struktur, die in den Abbildungen 5.22.b

und c erkennbar ist. Die Auflösung in diesen Abbildungen liegt, aufgrund der speziellen Probenvorbereitung, im Subnanometerbereich. Es werden die Atomsäulen der einzelnen Kristalle sichtbar. Die Korngröße lässt sich anhand dieser Analyse auf 5 - 15 nm abschätzen. Zwischen den Kristallen sind keine Korngrenzen zu erkennen. Es ist eine sehr dicht gepackte Struktur, deren Bestandteile W, Ti und N nicht voneinander zu unterscheiden sind. Zur genaueren Analyse wurde eine Elektronenenergieverlustspektroskopie (EELS) an dunkel und hell erscheinenden Bereichen durchgeführt. Diese Analyse ist in Abbildung 5.23 dargestellt. Das oberste EELS-Spektrum zeigt die Summe über den ganzen Spektrumsbereich der in der HRSTEM-Aufnahme markiert ist. Bei genauer Beobachtung der Einzelspektren fällt auf, dass geringe Unterschiede in den Spektren von Ti und N existieren. Dies ist abhängig davon, ob ein dunkel oder hell erscheinender Bereich analysiert wurde. In dunklen Bereichen steigt das Ti- und das N-Signal an. Am Rande der dunklen Bereiche sinkt dieses. Dies passt zu dem Erscheinungsbild im HAADF-Detektor und den bisherigen Ergebnissen. In dieser Detektionsart erscheinen schwere Elemente hell und leichtere dunkel. Diese Tatsache bestätigt das EELS-Spektrum, sodass Spektrum 2 einen Ti-reicheren Bereich darstellt als Spektrum 1.

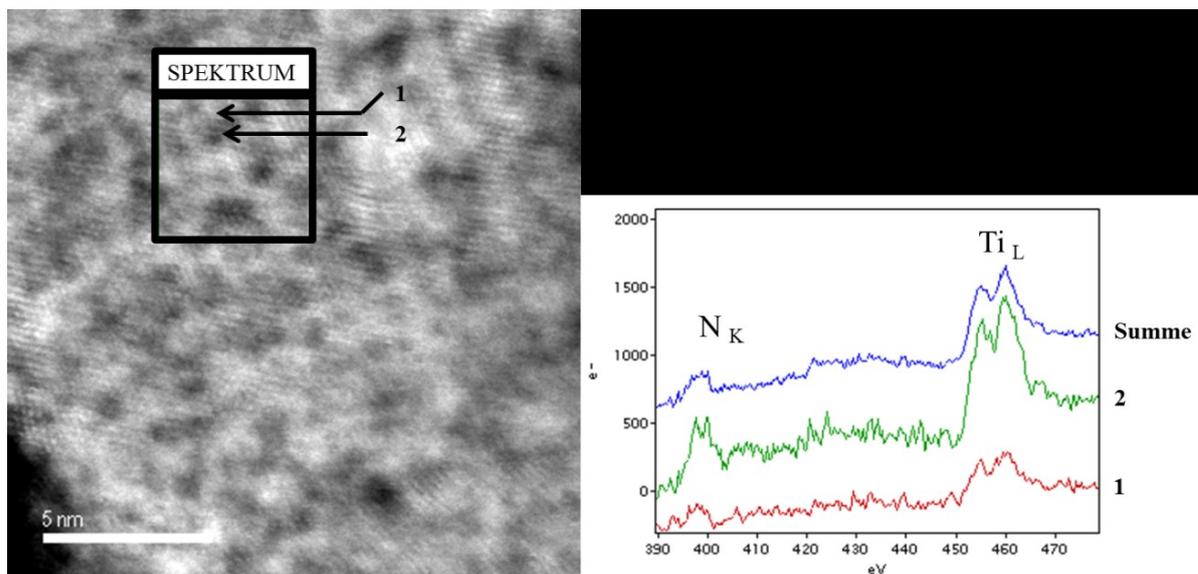


Abbildung 5.23: HRSTEM-Analyse von WTiN mit einem HAADF-Detektor und dazugehörigem Ausschnitt eines EELS-Spektrums.

Die TEM-Analysen zeigen, dass neben der dendritischen auch eine polykristalline Struktur besteht. Die Korngröße beträgt circa 5 - 15 nm. Dabei scheint es sich vorwiegend um einen Mischkristall aus W, Ti und N zu handeln. Neben den Mischkristallen sind außerdem Ti-reichere Kristalle enthalten, welche im Größenbereich < 1 nm liegen. Verglichen mit der errechneten Korngröße von WTi zeigt WTiN eine Kornverkleinerung. Dies deckt sich mit Untersuchungen von *Raaijmakers* et al. [70]. Eine Erklärung für diese Kornverkleinerung

ist die verminderte Beweglichkeit der Atome, wenn sie beim Abscheideprozess dem reaktiven Gas ausgesetzt werden [28].

In den XRD- und TEM-Untersuchungen konnte der Bindungszustand des Stickstoffs nicht eindeutig identifiziert werden. Die XRD-Spektren enthalten Hinweise, dass sich sowohl WN als auch TiN bildet. Eine zusätzliche XPS-Untersuchung sollte dies bestätigen. Als Proben hierfür wurden eine WTi-Dünnschicht als Referenz und eine WTiN-Dünnschicht ohne Al als Kapselschicht untersucht. Als Quelle wurde eine Al-K α Strahlung mit der Photonenenergie $h\nu = 1486$ eV benutzt. Um Oxidationseffekte auf der Probenoberfläche auszuschließen wurde je Probe eine Analyse direkt an der Oberfläche und eine nach 15 nm Sputterabtrag durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Tabelle 5.5 gesammelt. Im Anhang A.3 sind die dazugehörigen Detailspektren dargestellt. An beiden Proben ist anhand des hohen Sauerstofflevels vor Sputterabtrag ersichtlich, dass die Oberfläche oxidiert ist. Dies wird auch durch die C1s-Detailspektren bestätigt, die neben den Oxidationen auch eine Bildung von organischen Adsorbaten zeigen. Bei Betrachten der WTiN-Probe nach Sputterabtrag zeigt sich, dass sich ein Nitrid bildet, da Stickstoff zu 10,2 At.-% in der Probe nachgewiesen werden kann. Dies geschah anhand der N1s-Detailspektren, die eine signifikante Stickstoffhöhung aufweisen. Eine eindeutige Klassifizierung zu TiN oder WN ist nicht möglich, da Überlagerungen in den Spektren stattfinden. An den Ti2p-Detailspektren lässt sich bei 455,8 eV eine Erhöhung im Vergleich zur Referenz identifizieren, die auf TiN schließen lässt. WN ist an der erwarteten Peaks von 31,4 eV nicht im W4f-Spektrum nachweisbar, da dieser Peak von dem W-Signal (31,2 - 31,6 eV) überlagert wird. Die höheren Nitridanteile aus den N1s-Detailspektren im Vergleich zu denen aus den Ti2p-Spektren lassen aber WN-Anteile im W-Signal vermuten.

Tabelle 5.5: XPS-Analyseergebnisse von WTi und WTiN

	Abtrag [nm]	N [At.-%]	O [At.-%]	Ti [At.-%]	W [At.-%]
WTiN	0	9,2	42,1	8,7	21,5
WTiN	15	10,2	-	9,4	61,0
WTi	0	-	46,5	8,0	24,0
WTi	15	-	-	6,1	66,6

Zusammenfassung der Mikrostruktur von WTi und WTiN

- WTi und WTiN zeigen neben dem sputterbedingten kolumnaren bzw. dendritischen Wachstum eine Polykristallinität.

- Die Struktur ist sehr dicht gepackt. REM-Aufnahmen zeigen eine Art Wabenstruktur.
- Die Korngröße liegt für WTi bei circa 20 nm und für WTiN bei 5 - 15 nm. Letzteres wird durch die verminderte atomare Beweglichkeit bei der Bildung des Nitrids verursacht.
- Eine Segregation von W und Ti ist nicht erkennbar. Vielmehr ist davon auszugehen, dass es sich um eine Mischkristallbildung handelt. TEM-Ergebnisse zeigen allerdings, dass sich zwischen den Körnern der WTi-Matrix Ti-reichere Kristalle mit einer Korngröße von < 1 nm bilden.
- Stickstoff wird in WTiN signifikant nachgewiesen. Ein eindeutiger Nachweis, ob es dabei um WN oder TiN handelt, kann nicht erbracht werden. XRD- und XPS-Untersuchungen lassen aber die Schlussfolgerung zu, dass sich sowohl TiN als auch WN bildet.
- Die Kristallstruktur von WTi ist fcc und ändert sich zu bcc sobald Stickstoff partiell zu mindestens 0,1 zugesetzt wird.

5.3.3 Interpretation der Ergebnisse

Die mittels PVD-Sputtern hergestellten WTi- und WTiN-Dünnschichten basieren auf komplexen physikalischen Zusammenhängen. Das Verstehen dieser Zusammenhänge ermöglicht die Herstellung von zielführenden Al/Si-Diffusionsbarrieren. Die experimentellen, theoretischen und simulativen Ergebnisse zeigen, dass der Rücksputtereffekt einen hohen Einfluss auf die mechanischen, elektrischen und mikrostrukturellen Eigenschaften von WTi und WTiN besitzt. Dieser Effekt kann mit den Parametern Sputterdruck, Bias-Leistung und Wahl des Sputtergases beeinflusst werden. Die Anzahl und die Energie der rückgestreuten Edelgasatome wird durch die Wahl des Edelgases festgelegt und ist abhängig von der Atommassendifferenz zwischen Edelgas bzw. W und Ti im Target. Das Sputtergas Ar als leichtestes der getesteten Edelgase besitzt hierbei den höchsten Rücksputtereffekt, was auf den hohen Massenunterschied zwischen Ar und W zurückzuführen ist. Bei Verwendung von schweren Gasen wie z.B. Xe kann der Rücksputtereffekt deutlich reduziert werden. Das Rücksputtern bedeutet im Folgenden eine Reaktion mit dem Substrat bzw. der abgeschiedenen Schicht. Diese Reaktion kann wiederum durch die Prozessparameter Sputterdruck und additive Biasleistung beeinflusst werden. Je niedriger der Sputterdruck gewählt wird, desto höher ist die Rücksputterrate, da die Kollision von Ar mit Teilchen in der Transportphase verringert wird. Bei Erhöhung des Sputterdrucks steigt die Teilchendichte in der Prozesskammer und die Rücksputterrate wird verringert. Der Rücksputtereffekt spiegelt sich in der Abscheidetemperatur, der Stöchiometrie, dem Schichtwiderstand, dem Schichtstress und der Mikrostruktur wieder.

Bei Verwendung einer additiven Bias-Leistung kann die Reaktion mit dem Substrat und der abgeschiedenen Schicht noch verstärkt werden. Sie wirkt wie eine zusätzliche Beschleunigung der reflektierten Ar-Atome und verstärkt den Rücksputtereffekt. Mikrostrukturell ist das Rücksputtern an der sehr dicht gepackten Struktur des WTi und der geringen Kristallitgröße von 15 - 20 nm erkennbar. Die mit Stickstoff als reaktive Komponente hergestellten WTiN-Dünnschichten sind eine erfolgsversprechende Alternative für Barrieren gegenüber Al/Si-Diffusion. Der Rücksputtereffekt wird durch die Bildung von TiN abgeschwächt, was sich in höheren Ti/TiN-Gehältern widerspiegelt. Aufgrund der geringen Korngröße von 5 - 15 nm und der Bildung von reaktionsträgerem TiN ist die Dünnschicht als Barriere favorisiert. Die Nachteile des hohen Schichtwiderstands und Schichtstress, welche durch den Stickstoffeinbau verursacht werden, müssen jedoch prozessintegrativ getestet werden.

5.4 Herstellung von Al-Metallisierungen im PVD-Verfahren

Die Abscheidung von Al ist für die Herstellung der drei Gruppen der Testwafer (Kapitel 5.1) unerlässlich. Al zeichnet sich durch einen geringen Widerstand (2,65 Ωcm bei 20 °C), gute selektive Ätzbarkeit und eine gute Haftung zu sowohl Metallen, dielektrischen Schichten als auch Fotolacken aus [12]. Wie bereits erwähnt werden in dieser Arbeit Si-freie Al-Metallisierungen behandelt. Wie auch für die Diffusionsbarrieren wurden industrielle Sputteranlagen für die Abscheidung der Al-Metallisierung verwendet. Die Abscheidung der kompletten Metallisierung, also inklusive der Diffusionsbarriere, kann in situ oder ex situ geschehen. Der Begriff in situ beschreibt in diesem Zusammenhang, dass die Abscheidung der beiden Schichten direkt hintereinander in der gleichen Anlage erfolgt. Das bedeutet, dass zwei Prozesskammern mit unterschiedlichen Targets benutzt werden, diese aber an einer Anlage mit derselben Transferkammer angeschlossen sind. Die Wafer befinden sich zwischen den Prozessen weiterhin in einem Vorvakuum der Anlage und haben kein Kontakt zur Reinraumatmosphäre. Diese Prozessführung hat den Vorteil, dass die Oxidations- und Kontaminationsgefahr auf den Wafern deutlich reduziert ist. Im Gegensatz dazu beschreibt der Begriff ex situ ein Abscheiden von zwei Schichten mit einer zeitlichen Unterbrechung und Kontakt der Wafer zur Reinraumatmosphäre. Zwischen den Metallabscheidungen können weitere Prozesse, wie z.B. eine Strukturierung der ersten Metallschicht, eingeführt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurden je nach Ätzverfahren sowohl die in situ als auch die ex situ Abscheidung verwendet.

Die Abscheidung der Al-Metallschicht wurde mittels eines Al_{0,5}Cu (At.-%) Targets getätigt. Aufgrund der beschriebenen Vorteile wurde mit einer vergleichsweise hohen Leistung von circa 10 kW gearbeitet. Der Druck während der Abscheidung lag bei $0,5 \times 10^{-3}$ mbar, welcher über einen konstanten Ar-Fluss eingestellt wurde. Die Abscheiderate lag bei circa 18 nm/s. Aufgrund der hohen Leistungen ist mit Abscheidetemperaturen > 400 °C zu rechnen. Die Bestätigung für die im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung, hohen Temperatur findet sich in Abbildung 2.8. In dieser Abbildung ist ein Trench-IGBT aus einer der Versuchsreihen mit genannten Al-Abscheideparametern gezeigt. Sichtbar wird die vergleichsweise hohe Temperatur während der Abscheidung an dem rekristallisierten Gefüge des Aluminiums mit großen Körnern (ca. 500 nm), welches verdeutlicht, dass die Abscheidung in der Zone 3 des Thornton-Modells stattgefunden hat (Abbildung 3.2). Als Referenz wurden zusätzlich Wafer mit einer Si-gesättigten Metallisierung von einem Al_{1,0}Si_{0,5}Cu (At.-%) Target prozessiert. Die Leistung wurde um 50% reduziert, sodass die Si-Ausscheidung möglichst klein gehalten werden konnte. Die Abscheiderate sinkt durch die Leistungsreduzierung jedoch deutlich.

5.5 Temperaturstabilität von WTi und WTiN als Diffusionsbarriere

Wesentliche Ergebnisse dieses Kapitels wurden bereits vorab in den Publikationen von Plappert et al. [73] und Fugger und Plappert et al. [74] veröffentlicht.

5.5.1 Detektion des Ausfallmechanismus von WTi

Die Temperaturstabilität ist das wichtigste Kriterium zur Bewertung des Langzeitverhaltens der WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren. Dafür ist es unerlässlich den konkreten Ausfallmechanismus zu detektieren. Den ersten Hinweis auf jenen Ausfallmechanismus gab eine Analyse, in der eine HTS-getestete WTi/AlCu/Si-Probe auf Spiking kontrolliert wurde. Die Schichtdicken betragen 100 nm für die WTi-Barrierschicht und 3200 nm für die AlCu-Metallisierung. Die Abscheideparameter der WTi- und WTiN-Dünnschicht waren die empfohlenen aus Kapitel 5.3.1. Die Probe wurde im HTS-Test unter inerter Atmosphäre bei 450 °C für 14 h gelagert. Anschließend wurden die Metallschicht mit Phosphorsäure (H₃PO₄) und die Barrierschicht mit einer wässrigen Wasserstoffperoxidlösung (H₂O₂) chemisch abgelöst, um das Spikingverhalten im Silizium zu bewerten. Abbildung 5.24 zeigt diese Probe nachdem die Metallisierung und die Barriere chemisch entfernt wurden. Es blieben jedoch aufgrund einer zu kurzen Ätzzeit Reste der Barrierenmetallisierung zurück. Die Entfernung der Barriere fand vorwiegend dort statt, wo sich Spikes im darunter liegenden Silizium gebildet hatten. Eine Erklärung

hierfür wäre, dass entweder eine Volumensexpansion durch die Al/Si-Reaktion stattgefunden hat. Eine weitere Möglichkeit ist, dass in diesen Bereichen Ti herausgelöst wurde und somit die Barrierenschicht delaminiert, da Ti als Adhäsionsvermittler gilt [48]. Eine EDX-Analyse auf der stehengebliebenen Barrierenschicht bestätigte diese Vermutung (Abbildung 5.25). Obwohl die Barrierenschicht eindeutig durch das W-Signal zwischen 1,75 und 1,85 keV identifiziert wird ist kein, bzw. deutlich vermindertes, Ti-Signal bei $\approx 4,5$ keV (Tika) zu erkennen. Es sei hierbei angemerkt, dass die Ätzung mit H_2O_2 Ti nicht direkt angreift, sondern nur das W und somit Ti indirekt mit abgelöst wird. Daher kann eine Ti-Abreicherung durch Ätzangriff ausgeschlossen werden. Dies ist der erste Hinweis, dass Ti aus der Barriere hinausdiffundiert.

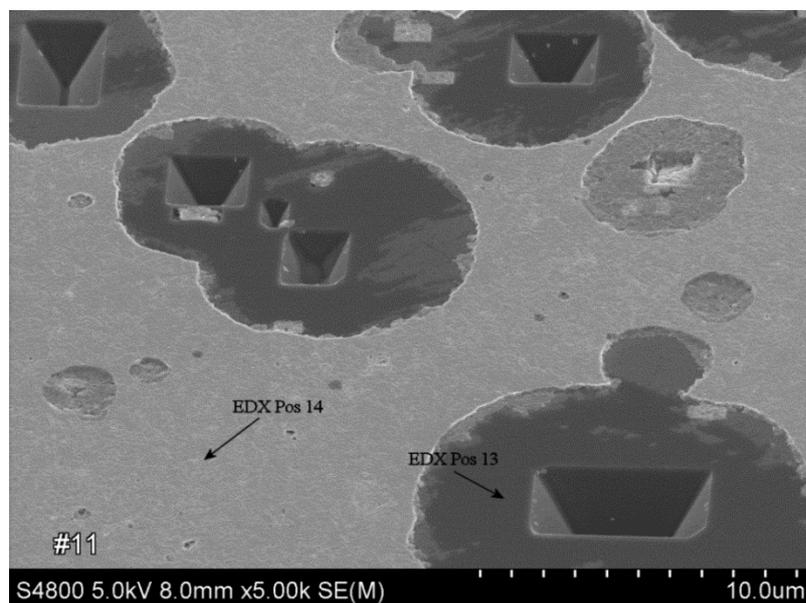


Abbildung 5.24: REM-Aufsicht auf eine Probe mit abgelöstem AlCu nach HTS-Test bei 450 °C für 14 h. Auf dem Si sind noch Reste der abgelösten WTi-Barriere ersichtlich. EDX Pos 13: C, Si, O; EDX Pos 14: C, O, W, Al (Abbildung 5.25).

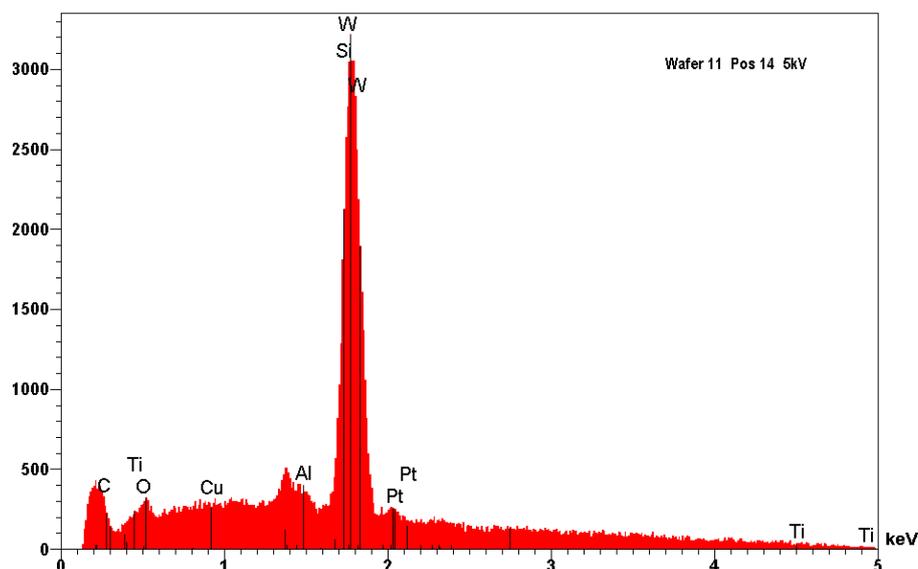


Abbildung 5.25: Ausgewähltes EDX-Spektrum Pos 14 aus Abbildung 5.24 von einer getemperten WTi-Schicht nach Tempern bei 450 °C für 14 h.

Da Ti an der Grenzschicht zum Si nicht nachgewiesen werden konnte und eine Diffusion in den Siliziumkristall aufgrund der Diffusionsparameter nach *Börnstein* [11] und der eingeschränkten Temperatur auszuschließen ist, wurde eine Diffusion in die Al-Metallisierung geprüft. In erster Instanz wurde ein Ti-Diffusion durch die Al-Metallisierung zur Oberfläche vermutet. Ti kann dort den geringsten Energiezustand einnehmen und zu TiO_2 reagieren. Diese Reaktion kann erst an der Oberfläche stattfinden, da der Sauerstofflevel im Al aufgrund der Selbstpassivierung sehr gering ist. Für die Analyse zur Überprüfung der Diffusionsvermutung wurden gleichartig hergestellte und getemperte Proben in einer oberflächensensitiven TXRF-Messung im Vergleich zu einer ungetemperten Referenz bewertet. Abbildung 5.26 zeigt ein vergleichendes TXRF-Spektrum in dem klar ersichtlich ist, dass die Ti-Konzentration an der Oberfläche nach der Temperaturbelastung stark zunimmt. Sowohl die Intensität des Ti ka bei 4,5keV als auch die des Ti $\text{k}\beta$ bei 4,7keV sind im Vergleich zur ungetemperten Referenz deutlich erhöht.

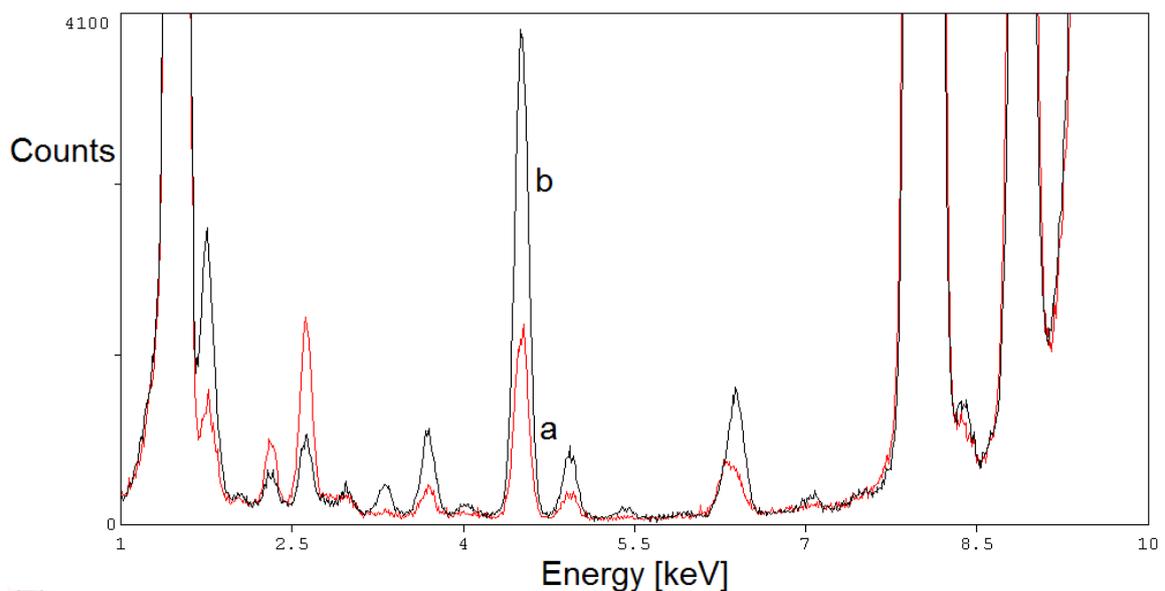


Abbildung 5.26: TXRF-Spektrum einer Si/WTi/AlCu-Probe nach a) Abscheidung und b) nach HTS-Test bei 450 °C für 14h.

Zum einen wurde die Diffusion des Ti aus der Barriere bewiesen, und zum anderen wurde festgestellt, dass die Temperatur während des AlCu- und WTi-Sputterns hoch genug ist, um diesen Diffusionsprozess, wenn auch in kleinerer Größenordnung, zu starten, da auch bei der ungetemperten Referenz Ti-Peaks zu erkennen sind. Die höchste Temperaturbelastung findet hierbei während der AlCu-Abscheidung statt. Der beheizte Chuck (350 °C), die kinetische Energie der einfallenden Al- und Cu-Atome bzw. der Edelgasionen und die Kondensationswärme erzeugen Temperaturen von circa 450 °C. Wenn die Temperaturbelastung auch nur für kurze Zeit erreicht wird (Prozesszeit \approx 3 min für 3 μm AlCu) reicht dies aus um den Diffusionsprozess zu starten. In den Analysen von *Olowolafe* et al. [64] und *Palmstrom* et al. [71] ist eine Ti-Akkumulation bei Temperaturen

$\geq 500\text{ °C}$ durch eine Rutherford-Rückstreu-Spektrometrie-Analyse ebenfalls beobachtet worden. Dieser Effekt wurde jedoch nicht näher zur Bewertung des Fehlermechanismus herangezogen. Zusätzlich zu diesen Resultaten konnte hier gezeigt werden, dass jene Diffusion auch bei Temperaturen $\leq 450\text{ °C}$ stattfindet.

Um diese Ti-Diffusion zu charakterisieren wurde eine weitere Versuchsreihe definiert, um Tiefendifusionsprofile von Ti im Al bei verschiedenen Temperaturen und Zeiten zu erhalten. Kapitel 5.5.2 beinhaltet die Berechnung der Aktivierungsenergie für diese Ti-Diffusion. In Abbildung 5.27 sind grundlegende SIMS-Tiefenprofile des Probenaufbaus Si/WTi/AlCu vor und nach Temperaturbelastung gezeigt. Die Schichtdicke der Al-Metallisierung beträgt 1000 nm und die der Diffusionsbarriere 100 nm. Beide Diagramme sind vom Startpunkt $x=0$ weg zu beurteilen. Die unterschiedlichen Startpunkte ergeben sich durch Abweichungen in der AlCu-Schichtdicke. Die Graphen wurden in Folge dessen anhand von Schichtdickenmessungen normiert. Als Bezugspunkt wurde die Grenzfläche am Si-Substrat gewählt, sodass die Grenzflächenreaktionen an der Barrierenmetallisierung beurteilt werden konnte.

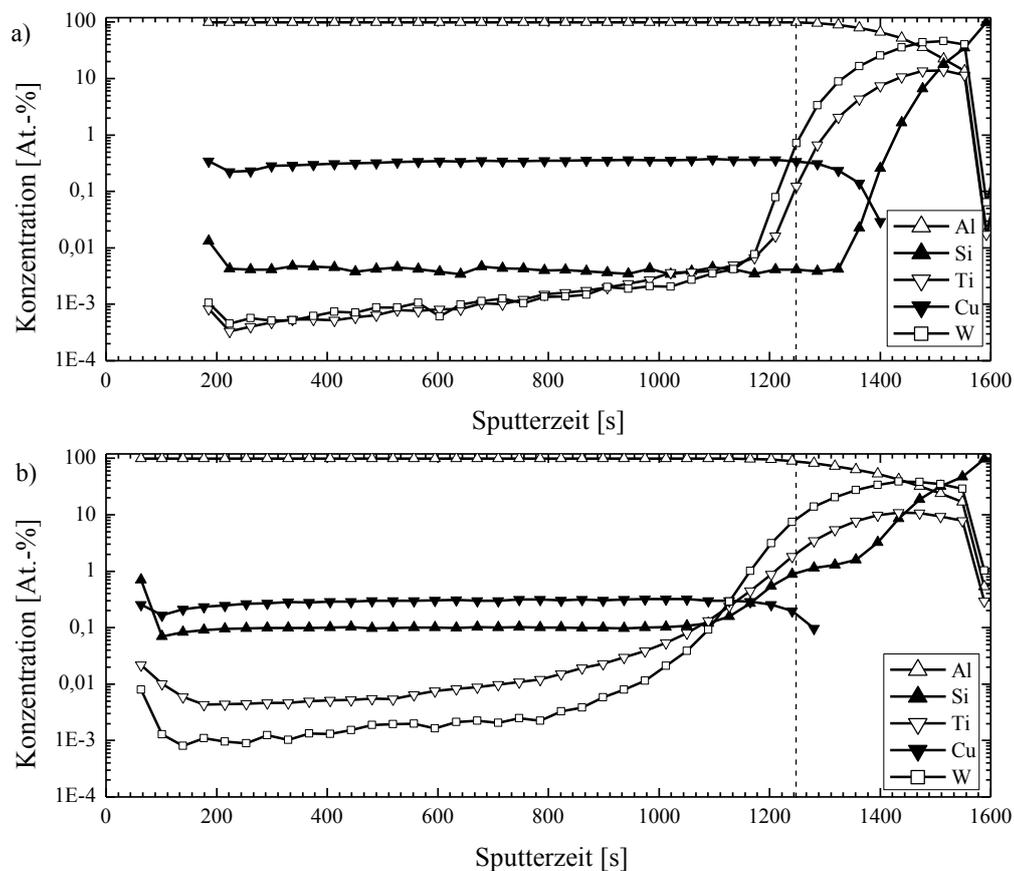


Abbildung 5.27: SIMS-Tiefenprofil von Si/WTi/AlCu a) nach Abscheidung und b) nach zusätzlicher Temperaturbelastung von 400 °C für 14 h in inerte Atmosphäre.

Die Signale der Sputterzeiten < 1200 s repräsentieren die Elementverteilung in der AlCu-Schicht. Es ist ersichtlich, dass Ti in der temperaturbelasteten Probe von 0,1 - 1 At.-% in Barrierennähe diffundiert. Über die komplette AlCu-Schicht hinweg, bei Sputterzeiten < 1000 s ist Ti mit 0,01 At.-% detektierbar. Im Vergleich zur unbelasteten Referenz beträgt das Delta in der Metallisierung 101 At.-% und die Grenzflächen sind eindeutig definiert und frei von Ti-Diffusion. Die Nachweisgrenze des Ti in diesem Messaufbau beträgt 1×10^{-6} At.-%. Das angestiegene Si-Signal bei Sputterzeiten < 1300 s demonstriert die undichte, fehlerhafte Barriere, da Al/Si-Diffusion stattgefunden hat. Die Si-Sättigung hat sich mit 0,1 At.-% über die komplette Schichtdicke des AlCu eingestellt, was sich mit dem Phasendiagramm aus Abbildung 2.5 bei 400 °C deckt. Das Cu-Signal zeigt keine Auffälligkeiten, was auf die Stabilität der 0,5 At.-% Sättigung hinweist. Bei Sputterzeiten > 1200 s wird das Cu-Signal nicht mehr verfolgt, da es zu einer Interferenz mit Ti_xO_y aus der Barriere kommt. Diese Cluster entstehen bei O_2^+ -Ionenbeschuss während der SIMS-Analyse. Der Verlust des Ti in der Barriere ist auch an der absoluten Ti-Peakhöhe in der Barriere sichtbar. Ein Delta von 3 At.-% ist beim Vergleich von Abbildung 5.27.a und b ablesbar. Ein derartig massiver Verlust wurde bisher noch nicht detektiert sondern nur anhand von Erhöhungen an Schichtwiderständen vermutet [75]. In Anbetracht dessen, dass die WTi-Barriere nur ein Zehntel der Metallisierungsdicke besitzt und in diesem Anteil auch nur 19 At.-% Ti vorhanden sind, ist die detektierte Diffusion als sehr kritisch einzustufen. In Kapitel 5.3.2 wurde gezeigt, dass es sich bei WTi um einen Mischkristall aus W und Ti handelt. Dieser wird nun durch den Verlust an Ti verändert bzw. geschädigt. An der Grenzfläche von Metallisierung und WTi-Barriere ist zusätzlich eine Verbreiterung der Barriere infolge von Diffusionsprozessen erkennbar. Auch das W-Signal verbreitert sich, ist jedoch nicht so stark und zeigt nach der Grenzschicht zur Metallisierung keine Erhöhung mehr. Die detektierten Elementverteilungen via SIMS bestätigen die Vermutung aus SEM, EDX und TXRF und zeigen das Modell des Fehlermechanismus:

- Bei Abscheidung wird die Pseudolegierung WTi in Form von Mischkristallen und singulären Kristallen abgeschieden. Über die Sputterparameter wird der Dünnschicht eine Struktur vorgegeben. Ti diffundiert bei Temperaturen ab 350 °C aus dieser Schicht hinaus. W kann diesen Verlust aufgrund zu geringer Temperaturen ($T_h(W; 400 \text{ °C}) = 0,1$) nicht über plastische Verformungen ausgleichen und es entstehen potentielle Diffusionspfade zwischen den Kristalliten (Kleinwinkelkorngrenzen) oder den Körnern (Korngrenzen). Der Nachweis, dass eine blockierte Ti Diffusion eine Verbesserung der Barrierenstabilität ergibt, wird in Kapitel 5.5.4 gezeigt.

5.5.2 Ermittlung der Aktivierungsenergie für den Ausfallmechanismus

Im vorigen Kapitel wurde die Ti-Diffusion als Ausfallmechanismus für WTi-Diffusionsbarrieren in Verbindung mit Al-Metallisierungen beschrieben. Nun soll die Geschwindigkeit dieser Reaktion in Abhängigkeit von der Temperatur anhand des *Arrhenius*-Modells gezeigt werden. Im Zuge dessen wurden mehrere Proben vorbereitet, die unter verschiedenen Temperaturen und Zeiten getestet wurden. Die Ti-Diffusion jeder belasteten Probe wurde mittels SIMS-Messungen detektiert. Die Barrierentestscheiben wurden, wie in Kapitel 5.1 beschrieben, vorbereitet und prozessiert. Die WTi-Barriere wurde mit Argon als Sputtergas und 80 W Bias aber ohne reaktive Komponente hergestellt. Die nachfolgenden Untersuchungen zeigten, dass es sich bei dieser Testgruppe um eine der stabilsten WTi-Barrieren handelt, die nicht reaktiv gesputtert ist. Die Barrierendicke betrug 100 nm und die Al-Schichtdicke jeweils 1000 nm. Als Temperaturbelastungen wurden 350 °C, 375 °C und 400 °C gewählt. Die Temperaturen haben eine große Relevanz zu Halbleiterprozessen, wie sie typischerweise nach der Metallisierung der Wafervorderseite weiter auftreten. Da für die Reaktionsratenbeschleunigung dieser Diffusion bisher keine Erfahrungen bestanden, wurden anhand der Aktivierungsenergie für reine Ti-Fremdstoffdiffusion in Al nach den Tabellenwerken von *Neumann et al.* [54] die Temperaturbelastungsdauer abgeschätzt. Die verwendeten Temperaturen und Zeiten sind in Tabelle 5.6 dargestellt.

Tabelle 5.6: Übersicht der HTS-Bedingungen zur Ermittlung der Aktivierungsenergie nach Arrhenius

	HTS-Temperatur		
	350 °C	375 °C	400 °C
HTS-Zeit	14 h	3 h	1 h
	50 h	10 h	4 h
	200 h	40 h	14 h

In Abbildung 5.28 sind die SIMS-Tiefenprofile von Ti nach verschiedenen HTS-Tests dargestellt. Wie in Abbildung 5.27 repräsentieren die Sputterzeiten bis zu 1200 s die Al-Metallisierung. Das Ti-Signal zeigt deutliche Unterschiede je nachdem wie lange bzw. hoch die Temperaturbelastung war. Ein deutlicher Unterschied ist an der Grenzfläche von der Metallisierung zur Barriere sichtbar. Je länger die Temperaturbelastung der Probe war, desto flacher verläuft im Anschluss der Anstieg des Ti-Signals bei der Tiefenmessung. Eine weitere Veränderung ist in der Al-Metallisierung sichtbar. Die Ti-Sättigung ist bei Sputterzeiten < 800 s je nach Probenbelastung in der Höhe unterschiedlich. Je länger die Probe belastet wurde desto höher ist der Level von Ti in der Al-Metallisierung. Diese Beobachtungen lassen auf eine Temperatur- und Zeitabhängigkeit der Ti-Diffusion schließen. Das bedeutet, dass bei hohen Temperaturen ein Abflachen der Steigung des Ti-

Signals an der Grenzschicht und ein Erhöhen des Ti-Levels im Al schneller als bei niedrigeren Temperaturen stattfindet. Im Umkehrschluss wird festgestellt, dass die gleiche Kurvenform auch bei geringeren Temperaturen erreicht wird. Dies geschieht allerdings nur bei längeren Belastungszeiten. Betrachtet man zum Beispiel die Kurve nach Belastung bei 400 °C für 14 h in Abbildung 5.28.d, so erkennt man eine stark abgeflachte Ti-Kurve. In Abbildung 5.28.b und c kann jedoch die gleiche Diffusionskurve auch mit geringeren Temperaturen (350 °C, 375 °C) erreicht werden. Es sind jedoch im Fall der Belastung bei 350 °C für 200 h und bei 375 °C für 40 h notwendig.

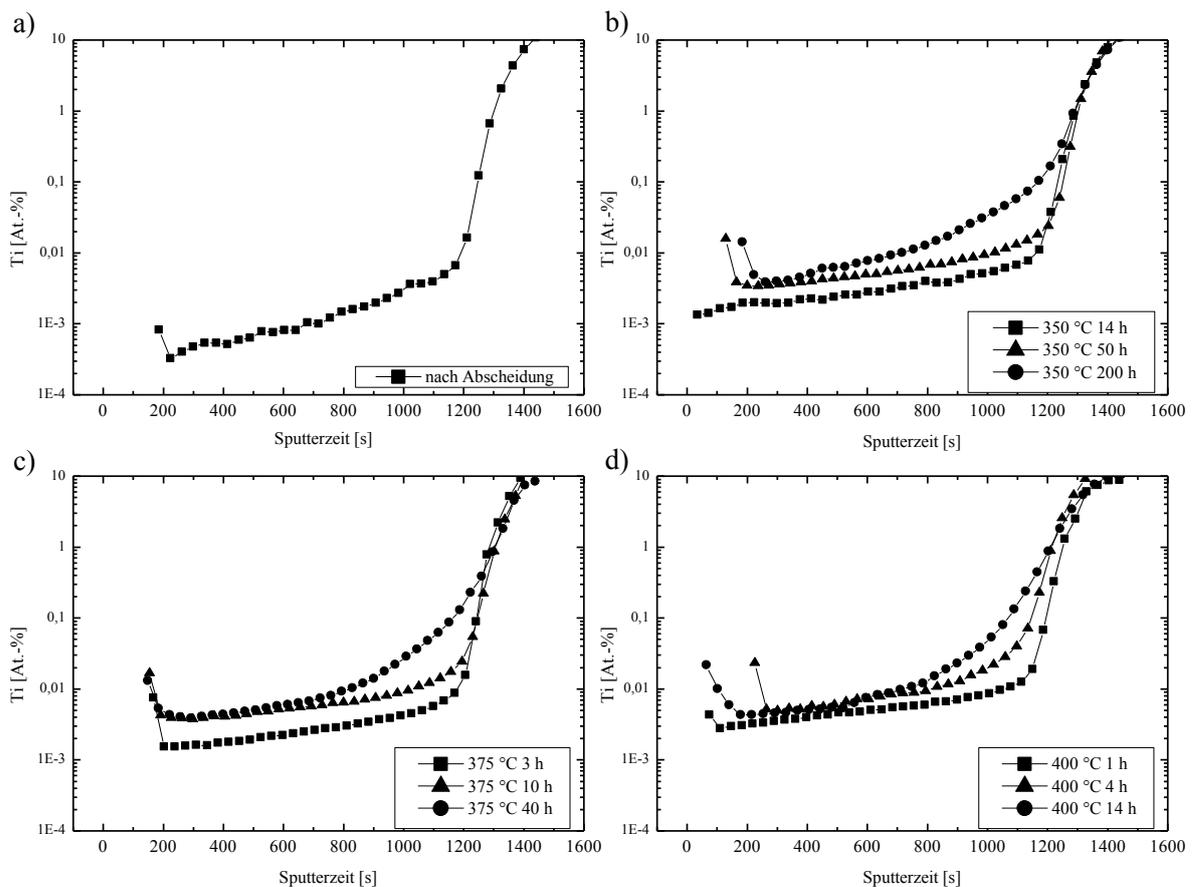


Abbildung 5.28: SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu (1000 nm)/WTi (100 nm) nach a) Abscheidung, b) 350 °C, c) 375 °C, d) 400 °C HTS-Test bei jeweils drei Belastungszeiten.

Zusätzlich zum reinen Diffusionsverhalten von Ti fallen drei Abschnitte der Diffusionskurve auf, die sich anhand der Steigung identifizieren lassen. Nahe der Grenzschicht zwischen Al und WTi ist ein hoher Anstieg der Ti-Diffusionskurve zu erkennen. Dieses Verhalten flacht stark ab und führt bis hin zu einer fast waagerechten Kurve sehr geringer Steigung. Analog zu Betrachtungen von *Lundy et al.* [76] ist diese Kurve in 3 Abschnitte zu unterteilen. In Abbildung 5.29 ist diese schematische Diffusionskurve mit einer experimentell ermittelten Kurve (400 °C, 14 h) verglichen. Es

handelt sich dabei um die Ti-Diffusionskurve aus Abbildung 5.28.d nach 14 h in einer anderen Darstellungsform.

- Abschnitt 1 kennzeichnet einen Grenzflächeneffekt (NSE: *near surface effect*). Die hohe Steigung ergibt sich aus der Oberflächenrauigkeit und dem damit verbundenen hohen Konzentrationsanstieg bis zur relativen Konzentration $(c/c_0) = 1$.
- Abschnitt 2 beschreibt die Diffusion durch das Kristallgitter. Sie verläuft in allen getesteten Temperaturen langsamer als z.B. die Diffusion über Korn- oder Phasengrenzen, aufgrund des geringen Diffusionsweges aber mit hohem Ti-Anteil.
- Abschnitt 3 stellt die Diffusion über extrinsische Effekte dar. Das kann zum Beispiel die Diffusion über Korngrenzen sein. Sie verläuft vergleichsweise schnell, aufgrund des langen Diffusionsweges aber mit geringerem Ti-Anteil.

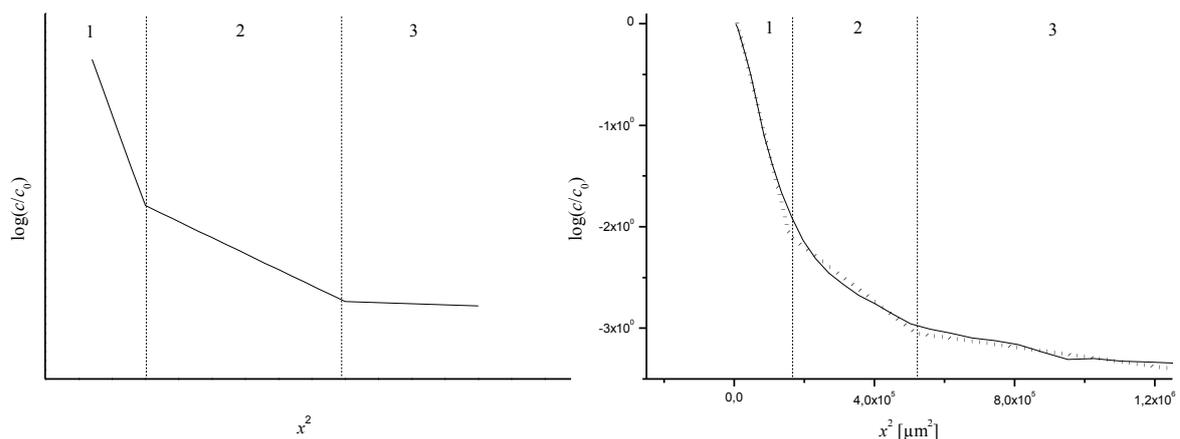


Abbildung 5.29: Vergleich der schematischen Penetrationskurve nach *Lundy et al.* [76] mit der experimentell ermittelten SIMS-Diffusionskurve von Ti in Al nach HTS-Test bei 400 °C für 14 h. Abschnitt 3 ist an der experimentell ermittelten Diffusionskurve um circa 50% gekürzt.

Die Abbildung 5.30 zeigt schematisch, wie die 3 Abschnitte der Diffusionsprofile entstehen. Die strichlierten Pfeile zeigen den Diffusionsweg des Ti an. In Abschnitt 1 sind Effekte miteinbezogen, die z.B. an den Grenzflächen entstehen. Die Steigung kann an diesen Grenzen nicht 100% betragen, da die Bestimmung der Diffusion in diesem schmalen Bereich aufgrund von z.B. Rauigkeiten nicht exakt möglich ist. Abschnitt 2 ergibt sich erst nach längeren Belastungszeiten und beschreibt die Gitterdiffusion. In den Diffusionsprofilen (Abbildung 5.28) ist dieser 2. Abschnitt bei jeder Temperaturbelastung in Kombination mit der höchsten Belastungszeit sichtbar. Dies ist bei der 400 °C Belastung bereits nach 4h sichtbar. Anhand der ermittelten Werte ist auch ersichtlich, dass in diesem Abschnitt viel Ti diffundiert. Diese Art der Diffusion benötigt vergleichsweise viel Energie

und findet somit langsam statt. Der 3. Abschnitt beschreibt die Ti-Diffusion über die Korngrenzen bis hin zur Oberfläche. Es muss vergleichsweise wenig Energie aufgebracht werden, damit Ti über diese Kristallstörungen diffundiert, sodass dies vergleichsweise schnell mit einer hohen Eindringtiefe geschieht.

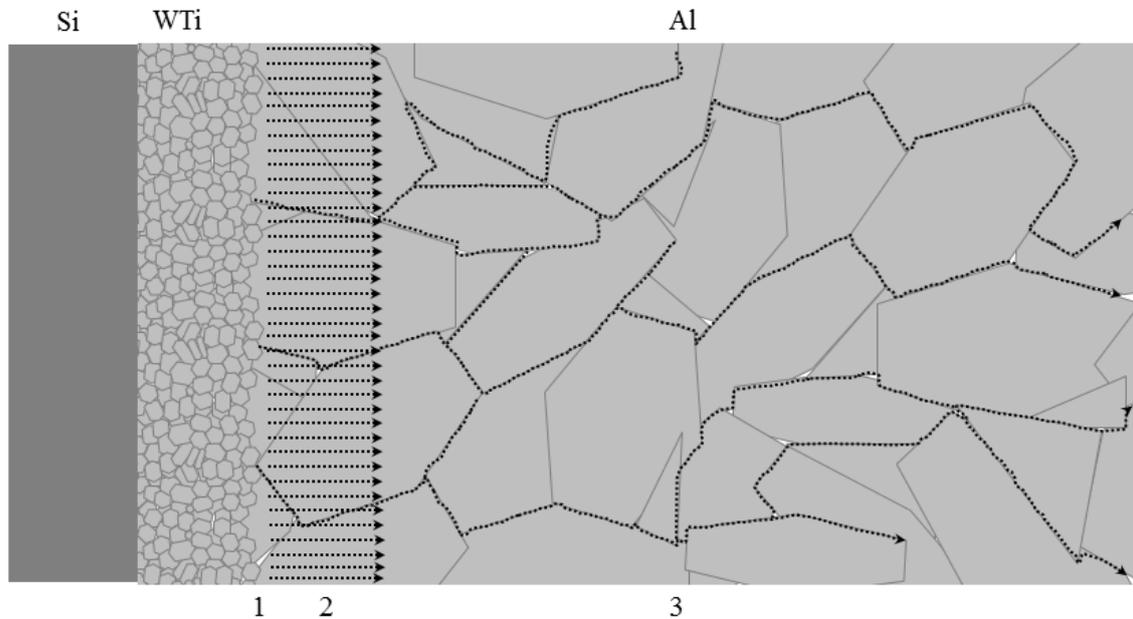


Abbildung 5.30: Schematische Darstellung des Ti-Diffusionswegs in Si/WTi/AlCu nach Temperaturbelastung.

Im Folgenden wird die Aktivierungsenergie für die Ti-Diffusion bestimmt. Aufgrund der hohen Ti-Konzentration und der eindeutigen Temperatur- und Zeitabhängigkeit im 2. Bereich der Ti-Diffusionskurve wird dieser für die Berechnung der Aktivierungsenergie genutzt. Die Randbedingungen der Proben sind allerdings nicht ideal. Zum einen ist das Ti in W als Mischkristall eingebaut. Zum anderen ist der Anteil von Ti im Gesamtsystem sehr gering. Diese Aspekte erschweren die Ermittlung von Aktivierungsenergie und Diffusionskoeffizienten mit bekannten Methoden, wie z.B. der *Bolzmänn-Matano-Methode* [8].

Es wurde in Kapitel 5.5.1 gezeigt, dass der Ausfallmechanismus für die WTi-Diffusionsbarriere in Verbindung mit Al die Ti-Diffusion ist. In Abbildung 5.28 ist deutlich erkennbar, dass bei allen getesteten Temperaturen viel Ti (bis zu 3 At.-%) aufgrund von Gitterdiffusion in der Barrierenschicht verloren geht. Aufgrund dieser Tatsache wird im Folgenden die Aktivierungsenergie für diese Gitterdiffusion bestimmt. Mithilfe des *Arrhenius-Modells* können temperaturaktivierte, nicht reversible Prozesse ausgewertet werden. Der Zusammenhang zwischen Reaktionsrate k , der Aktivierungsenergie E_a , der Boltzmannkonstante k_B und der absoluten Temperatur T in

Kelvin (K) ist in Gleichung (5.6) gezeigt. Die Variable A stellt einen Vorfaktor dar, der in den meisten Fällen als Konstante angesehen werden kann [77].

$$k = A \cdot e^{\frac{-E_a}{k_B \cdot T}} \quad (5.6)$$

Zur Bestimmung von E_a kann Gleichung (5.6) auch in der logarithmischer Form dargestellt werden, um die Aktivierungsenergie über die Steigung einer Geraden zu ermitteln:

$$\ln(k) = -\frac{E_a}{k_B} \cdot \frac{1}{T} + \ln(A) \quad (5.7)$$

Das Modell von *Arrhenius* kann auch in diesem Fall angewendet werden. Zur Bestimmung der Aktivierungsenergie muss zuerst die Reaktionsrate als temperaturabhängige Geschwindigkeitskonstante bestimmt werden. Dazu wird der Ti-Gehalt im Bereich der Gitterdiffusion relativ zur maximalen Ti-Konzentration in der Barriere bestimmt.

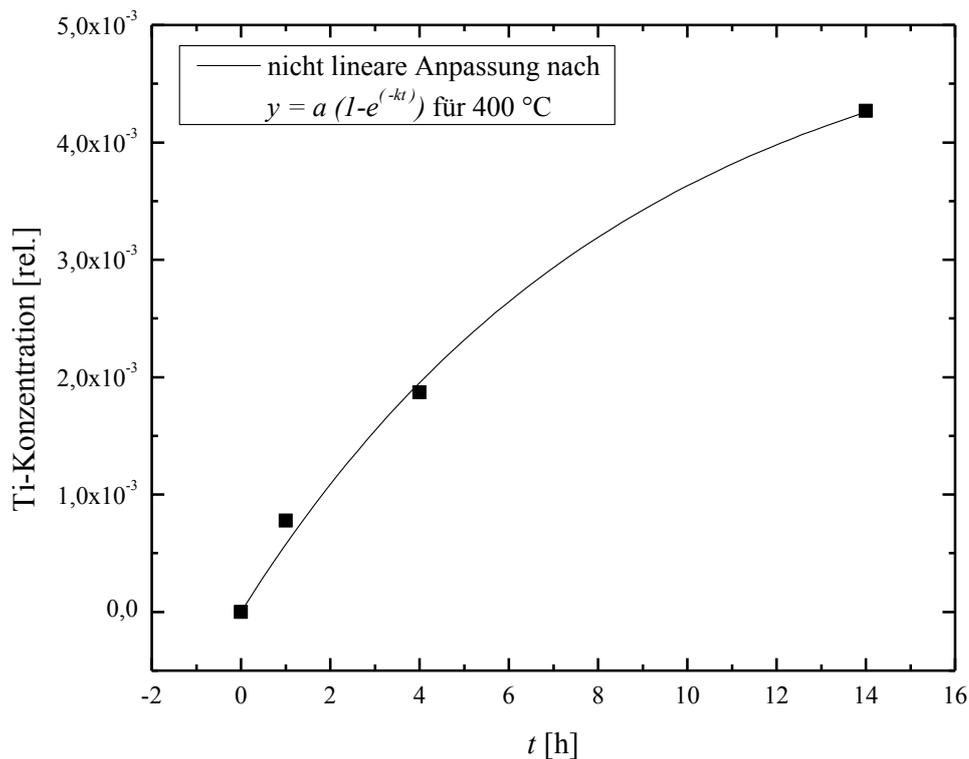


Abbildung 5.31: Relative Ti-Intensität in Bereich 2 (ca. 1100 Sputtersekunden.) der Diffusionskurve in Abhängigkeit der Zeit im HTS-Test bei 400 °C.

In Abbildung 5.31 ist der relative Ti-Gehalt in Abhängigkeit der Belastungszeit im HTS-Test bei 400 °C dargestellt. Die ermittelten Datenpunkte zeigen kein lineares Verhalten.

Dies ist auch sinngemäß, da nur sehr wenig Ti in der gesamten Probe enthalten ist. Es handelt sich um eine endliche Quelle, sodass die Sättigung bzw. das Verlangsamten der Diffusion zu erkennen ist. Das bedeutet allerdings, dass sich im Al aufgrund der sehr viel höheren Schichtdicke der Ti-Gehalt nicht gleich der Barrierenstöchiometrie einstellen kann. Somit kann die relative Ti-Konzentration niemals den Wert 1 erreichen. Für die nicht lineare Anpassung gilt Gleichung (5.8).

$$y = a \cdot (1 - e^{(-k \cdot t)}) \quad (5.8)$$

Der Faktor k stellt die Reaktionsrate dar. Der Vorfaktor a beschreibt, dass die Kurve nicht gegen 1, sondern gegen den Wert a strebt. Der Wert a wurde experimentell mit Hilfe eines HTS-Tests bei 450 °C ermittelt. Mittels einer nicht linearen Anpassung wurden daraufhin die Reaktionsraten für die HTS-Tests bei 350 °C, 375 °C und 400 °C berechnet (Anhang A.1). Der sich daraus ergebene *Arrhenius*-Graph ist in Abbildung 5.32 dargestellt. Die Steigung der Funktion ergibt eine Aktivierungsenergie für die Ti-Diffusion (durch das Al-Gitter) von 2,28 eV. Dieser Wert steht in gutem Zusammenhang mit der reinen Ti-Diffusion als Verunreinigung aus der Veröffentlichung von *Chi et al.* (2,6 eV) [78] und der Ti-Akkumulation aus WTi an einer AlCu-Oberfläche, welche von *Olowolafe et al.* (2,4 eV) veröffentlicht wurde [64].

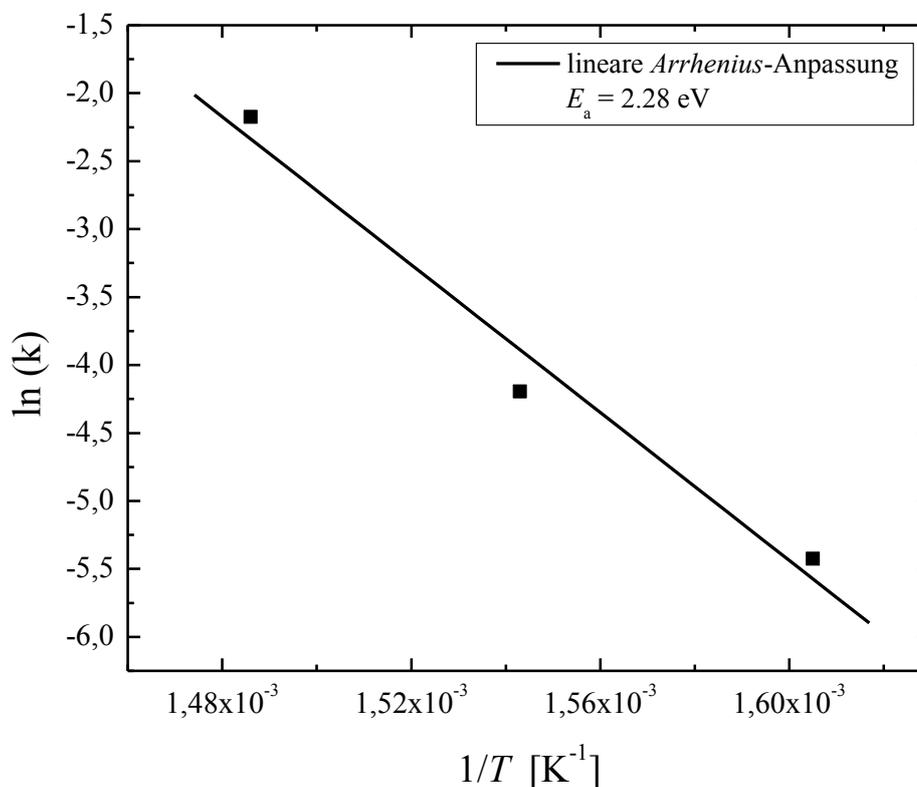


Abbildung 5.32: *Arrhenius*-Graph für die Ti-Diffusion bei 350 °C, 375 °C und 400 °C.

5.5.3 Einfluss der Stöchiometrie von WTi

In Kapitel 5.5.2 wurde gezeigt, dass der Bestandteil Ti in WTi nicht stabil gegenüber Diffusion in Al ist, und dass dies der Ausfallmechanismus von WTi ist. WTi lässt sich allerdings in diversen stöchiometrischen Zusammensetzungen abscheiden. Die Haupteinflüsse hierbei sind der Prozessdruck, Bias-Leistung und das Ionisierungsgas (Kapitel 5.3.1). In dieser Auswertung wird gezeigt, wie der Einfluss des Ti-Gehalts auf die Barrierenstabilität ist. Als Testprozedur zur Bewertung der Diffusionsstabilität wurden erneut Barrierentestscheiben hergestellt. Die Barrierendicke betrug 50 nm und die Al-Metallisierungsdicke 1000 nm. Die geringe Barrierendicke und ein HTS-Test bei 400 °C Belastungstemperatur stellten einen beschleunigten Test für die Barriere dar. Zur Bewertung nach diesem Test wurden die Al-Metallisierung und die WTi-Barriere vom Si-Substrat entfernt. Eine fehlerhafte Barriere würde ein sichtbares Al-Spiking im Substrat zeigen.

In Abbildung 5.33 ist die Al-Spiking-Analyse einer Ti-armen und Ti-reichen WTi-Barrierenmetallisierung bei 400 °C HTS-Test für 4 h gezeigt. In Abbildung 5.33.a ist die Ti-ärmere Barriere nach Metallisierungsablösung anhand eines REM-Bildes gezeigt. Es ist kein Al-Spiking ersichtlich, was auf eine gute Barrierenwirkung auch bei beschleunigtem Testen hindeutet. In Abbildung 5.33.b ist hingegen schon im optischen Mikroskop ersichtlich, dass eine Al/Si-Diffusion über die Barriere hinweg stattgefunden hat. Dieser Schnelltest beweist, dass der Ti-Anteil einen sehr großen Einfluss auf die Barrierenstabilität hat. Dieses Ergebnis passt sehr gut zu den Feststellungen aus Kapitel 5.5.1, in denen die Ti-Diffusion als Ausfallmechanismus herausgestellt wurde. Je mehr Ti in der WTi-Barriere vorhanden ist, desto höher ist auch die Diffusion von Ti in Al und desto mehr Leerstellen und potentielle Diffusionspfade können in der Barriere entstehen.

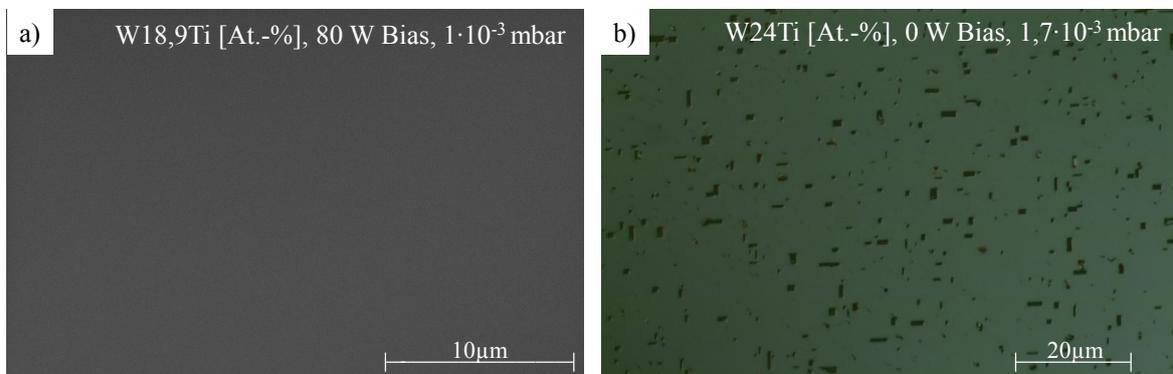


Abbildung 5.33: Al-Spiking-Analyse nach HTS-Test bei 400 °C für 4 h a) REM an W18,9Ti [At.-%] und b) Lichtmikroskop an W24Ti [At.-%] Barriere nach Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung.

Die Variation des Ti-Gehalts in der Barriere wurde in diesem beschriebenen Fall durch die Änderung des Sputterdrucks und die Wegnahme des additiven Bias erzielt. In Kapitel 3.1.1 wurde das *Thornton*-Modell vorgestellt und beschrieben, dass sich mit Erhöhen des Sputterdrucks die Schichtmorphologie verändert. Die Erhöhung des Sputterdrucks wirkt sich ähnlich aus, als ob die Substrattemperatur geringer wäre. Dies hätte im Extremfall eine poröse Schicht mit geringer Dichte und hoher Rauigkeit zu Folge. In der Ausarbeitung von *Müller* [69] ist ein experimenteller Beweis enthalten, dass diese Überlegung auch auf WTi anwendbar ist. Es wurde WTi unter 9×10^{-2} mbar Ar-Druck gesputtert. Ein Ti-Gehalt nahe der Targetstöchiometrie von circa 30 At.-% und ein extrem kolumnares Wachstum waren die Folge. Ein Vergleich dieses Ergebnisses mit einer WTi-Probe, welche bei 1×10^{-3} mbar Ar-Druck im Rahmen dieser Ausarbeitung gesputtert wurde, ist in Abbildung 5.34 dargestellt. Es ist deutlich erkennbar, dass mit steigendem Sputterdruck die WTi-Dünnschicht deutlich rauer und poröser wird. Es sei jedoch angemerkt, dass das *Thornton*-Modell eine solche Druckerhöhung nicht berücksichtigt. Zone 1 wird also bei weiterer Druckerhöhung noch zerklüfteter und poröser, wie es in Abbildung 5.34.a ersichtlich ist.

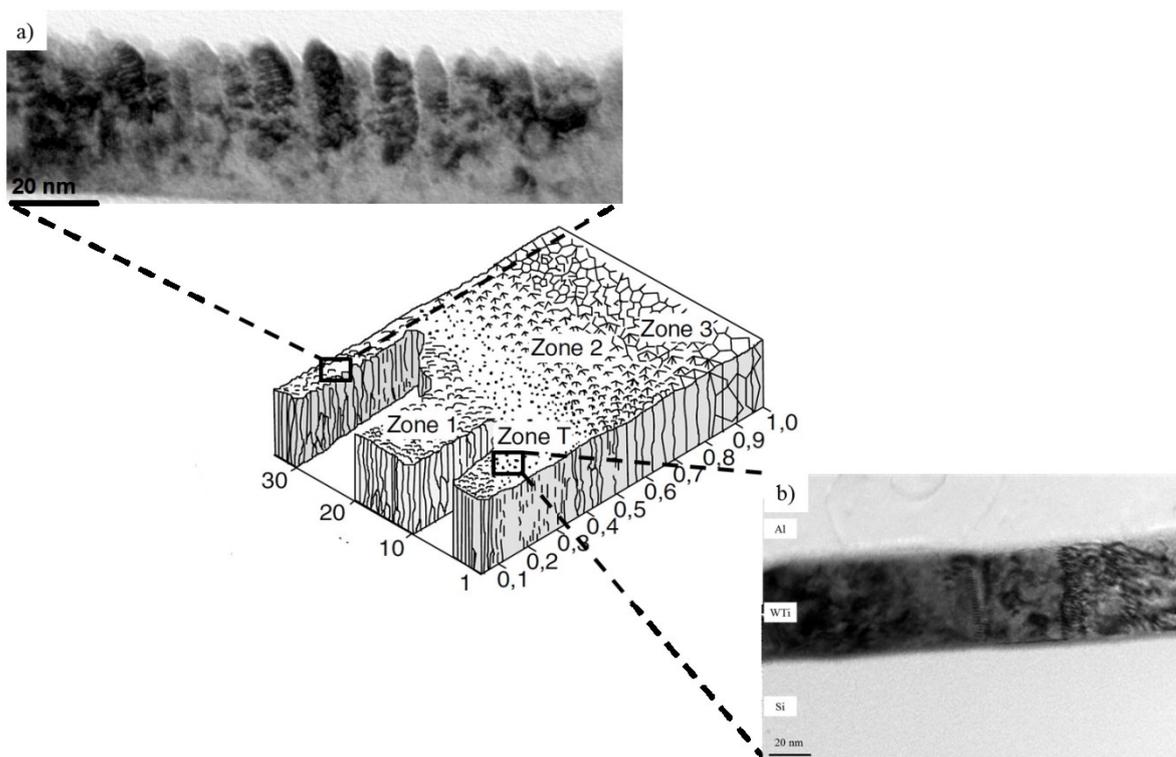


Abbildung 5.34: Einfluss des Sputterdrucks auf die Abscheidung von WTi anhand des Thornton Modells: TEM-Aufnahme von WTi, abgeschieden bei a) 9×10^{-2} mbar [69] und b) 1×10^{-3} mbar mit 2 kW Leistung und ohne Bias

Bei den in Abbildung 5.33 dargestellten Ergebnissen ist nur eine marginale Druckerhöhung ausgenutzt worden um den Ti-Gehalt zu erhöhen. Um die in Abbildung 5.34 dargestellte Mikrostrukturänderung als Grund einer instabilen Diffusionsbarriere auszuschließen wurde im Folgenden mit schwereren Edelgasen gesputtert. Bei Abscheidung von WTi mit Kr

oder Xe erhöht sich verglichen mit Ar als Sputtergas der Ti-Gehalt infolge von dem verringerten Rückspattern (Kapitel 5.3.1). Dabei wurden identische Prozessdrücke verwendet. In Abbildung 5.35 sind die TEM-Analysen dieser gesputterten WTi-Dünnschichten gezeigt. Die mikroskopischen Aufnahmen zeigen eindeutig, dass trotz eines höheren Ti-Gehalts (Kapitel 5.3.1) die Mikrostruktur vergleichbar ist. An keiner Dünnschicht sind zerklüftete oder poröse Strukturen erkennbar. Somit wird deutlich, dass nicht der Ti-Gehalt sondern ein hoher Sputterdruck für stark poröse Strukturen verantwortlich ist.

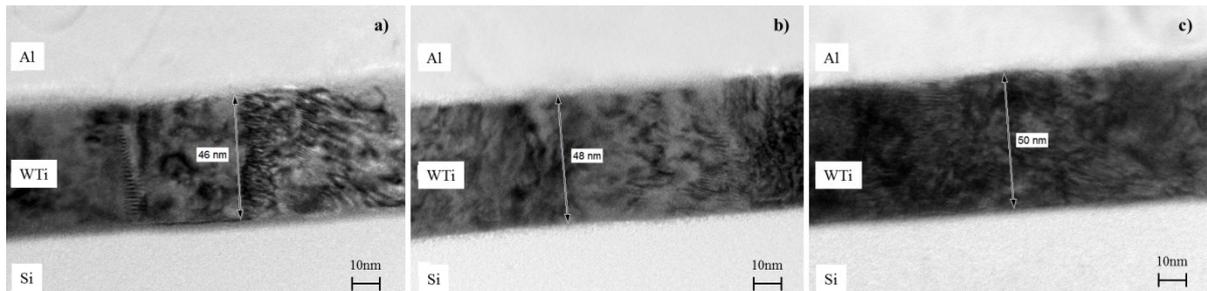


Abbildung 5.35: TEM-Aufnahmen von WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leistung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar, b) Kr und c) Xe als Sputtergas.

Für diese Varianten wurden HTS-Tests und anschließende Analysen, analog der in Abbildung 5.33 dargestellten Ergebnisse, durchgeführt. Die Ergebnisse der Barrierentests sind in Abbildung 5.36 dargestellt. Die mit Ar gesputterte Dünnschicht zeigt wie erwartet auch nach einem HTS-Test bei 400°C für 8 h eine gute Barrierenwirkung gegenüber Al/Si-Diffusion. Die deutlich Ti-reicheren Schichten (WTi_{Kr} : 27 At.-%, WTi_{Xe} : 28,5 At.-%) hingegen demonstrieren eine fehlerhafte Barriere, die durch Al-Spiking sichtbar wird. Dieses Ergebnis bestätigt die Schlussfolgerung, dass der Ti-Gehalt in WTi maßgeblich an der Barrierenlangzeitstabilität beteiligt ist. Je mehr Ti in WTi vorhanden ist, desto höher ist die Ti-Diffusion in Al aufgrund eines höheren Konzentrationsgradienten. Es ist davon auszugehen, dass der Mangel an ausdiffundiertem Ti in der Barriere zu Fehlstellen und potentiellen Diffusionspfaden führt.

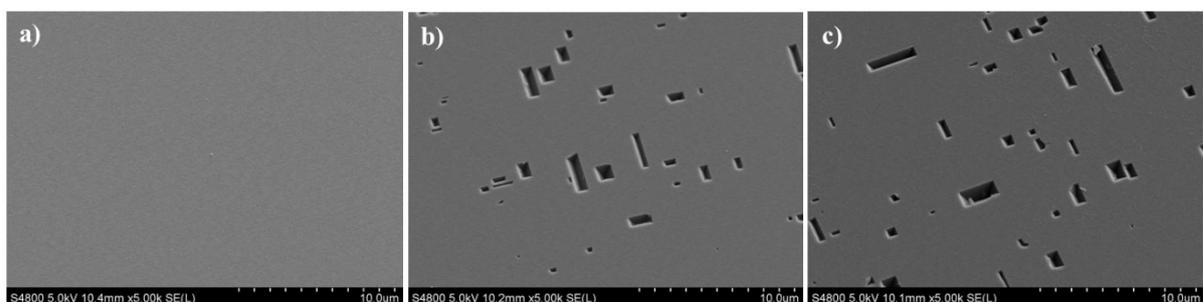


Abbildung 5.36: REM-Aufnahmen von WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leistung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar, b) Kr und c) Xe als Sputtergas nach HTS-Test bei 400°C für 8 h und nach Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass diese Resultate im Widerspruch zu den Ergebnissen von *Bergstrom* et al. stehen [63]. Dort wird berichtet, dass eine Verbesserung der Barrierenstabilität durch den Einsatz von schwereren Edelgasen und folglich höheren Ti-Gehältern erzielt werden kann. Unter Berücksichtigung der in dieser Arbeit angewendeten Testbedingungen der beschleunigten Alterung kann diese Aussage nicht bestätigt werden. *Bergstrom* et al. zeigen jedoch eine Phasenbildung von WAl_4 an der WTi/Al-Grenzfläche mit Hilfe von Temperaturen ≥ 500 °C. Diese Temperaturbereiche werden in dieser Arbeit nicht angewendet, da eine deutlich geschwächte Barriere schon bei Temperaturen ≤ 450 °C erkennbar war.

5.5.4 Unterdrücken des Fehlermechanismus durch reaktives Sputtern mit N_2

Es wurde gezeigt, dass die Ti-Diffusion aus WTi der Fehlermechanismus für den Barrierenausfall ist. Als Bestätigung für diese Annahme soll nun der Ti-Verlust in der Barriere gestoppt und eine höhere Stabilität gegenüber Diffusion bei beschleunigten Tests erreicht werden. Das in Kapitel 5.3 beschriebene reaktive Sputtern bietet sich als eine Verbesserung des Prozesses an. Es konnte in XRD- und XPS-Analysen gezeigt werden, dass unter anderem TiN gebildet wird. Das Ti ist somit gebunden und besitzt einen geringeren Energiezustand. Auch die Affinität zu Al ist geringer einzuschätzen. Außerdem ist davon auszugehen, dass der Energiegewinn bei der Bildung eines Titanoxids an der Al-Oberfläche nicht mehr so hoch ist. Alle Vorüberlegungen deuten auf eine verringerte Diffusion von Ti und somit einer verbesserten Barrierenwirkung hin. Dies ist vorerst nur eine Überlegung, da keine Diffusionsparameter von TiN in Al aus der Literatur bekannt sind. In den Ausarbeitungen von *Shaginyan* et al. [62], *Raaijmakers* et al. [70] und *Dirks* et al. [72] sind Analysen der Barriereigenschaften und den mikrostrukturellen Veränderungen von WTiN beschrieben. In diesen Veröffentlichungen ist jedoch kein Hinweis oder experimenteller Beweis enthalten aus welchem Grund die Nitridierung zur Steigerung der Barrierenstabilität beiträgt.

In Abbildung 5.37 ist das Ergebnis des Barrierentests nach einem HTS-Test bei 400 °C für 16 h dargestellt. Die WTi-Barriere ohne N_2 -Anteil (a) wird mit reaktiv gesputterten WTiN-Barrieren (b) und c) verglichen. Dabei wurden die in Kapitel 5.3.1 beschriebenen WTiN-Barrieren mit 0,2 und 0,33 N_2 - Partialfluss für die Versuche verwendet. Die Barriere ohne N_2 -Anteil zeigt deutliches Al-Spiking. Dies ist schon nach 8 h bei gleicher HTS-Temperaturbelastung zu erkennen. Die WTiN-Barrieren hingegen zeigen eine deutlich bessere Barrierenwirkung. Der geringere Partialfluss zeigt stark vermindertes Al-Spiking. Die WTiN-Gruppe mit 0,33 N_2 -Partialfluss demonstriert hingegen eine sehr gute Barrierenwirkung, bei der kein Spiking ersichtlich ist. Dieses gute Barrierenverhalten ist selbst nach 24 h im HTS-Test bei 400 °C zu erkennen (Abbildung 5.40).

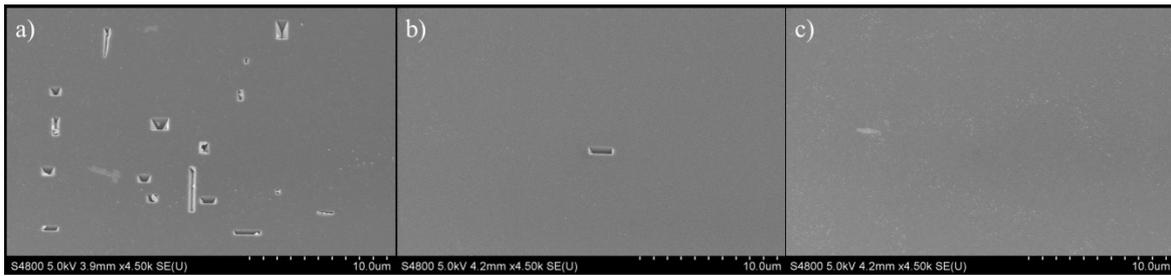


Abbildung 5.37: REM-Aufnahmen von 50 nm dicken WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leistung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar ohne N_2 , b) Ar mit 0,2 N_2 -Partialfluss c) Ar mit 0,33 N_2 -Partialfluss nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h und Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung.

Zur Überprüfung der verminderten Ti-Diffusion wurden an identischen Proben ToF-SIMS-Tiefenprofile erstellt. Die Ergebnisse dieser Analyse sind in Abbildung 5.38 und Abbildung 5.39 gezeigt. In Abbildung 5.38 ist das Ti-Tiefenprofil nach einem HTS-Test bei 400 °C für 16 h für die WTi- und die WTiN-Barrieren gezeigt. Die WTi-Dünnschicht ohne Stickstoffanteil zeigt das erwartete Diffusionsverhalten. Im Vergleich zu dieser Probe ist die Ti-Diffusion bei den nitridierten Varianten deutlich reduziert. Der zweite Bereich der Diffusion, welcher sich durch den höchsten Massetransport kennzeichnet, ist nicht mehr vorhanden. Die Gruppe mit dem höheren Partialfluss von 0,33 zeigt eine weitere Reduzierung der Ti-Diffusion. Einige Ti-Messwerte dieser Probe besitzen eine Zählrate von 0 oder 1. Verglichen mit den Messwerten einer Referenzprobe ohne Temperaturbelastung kann man hierbei von einem Rauschen ausgehen. In Abbildung 5.39 ist das Si-Tiefenprofil gezeigt. Der erhöhte Si-Anteil in der Al-Metallisierung an der stickstofffreien Probe beweist die Ergebnisse der Spikinguntersuchung aus Abbildung 5.37. Die Barriere ermöglicht eine Al/Si-Diffusion und somit ein Al-Spiking. Der Si-Anteil der nitridierten Probe ist sehr gering und im Rauschbereich des Messgeräts.

Der Vergleich der reaktiv gesputterten WTiN-Dünnschichten mit dem stickstofffreien WTi bestätigt, dass eine reduzierte Ti-Diffusion an den reaktiv gesputterten Proben vorliegt und dies zu einer besseren Barrierenwirkung führt. Es ist keine Ti-Diffusion zur Oberfläche des Aluminiums zu erkennen. Zudem fehlt der zweite Bereich der typischen Diffusionskurve völlig. Es ist somit davon auszugehen, dass die Bildung von Ti zu TiN in der WTi-Barriere die Diffusionsaffinität deutlich herabsetzt und somit die Barrierenstabilität erhöht.

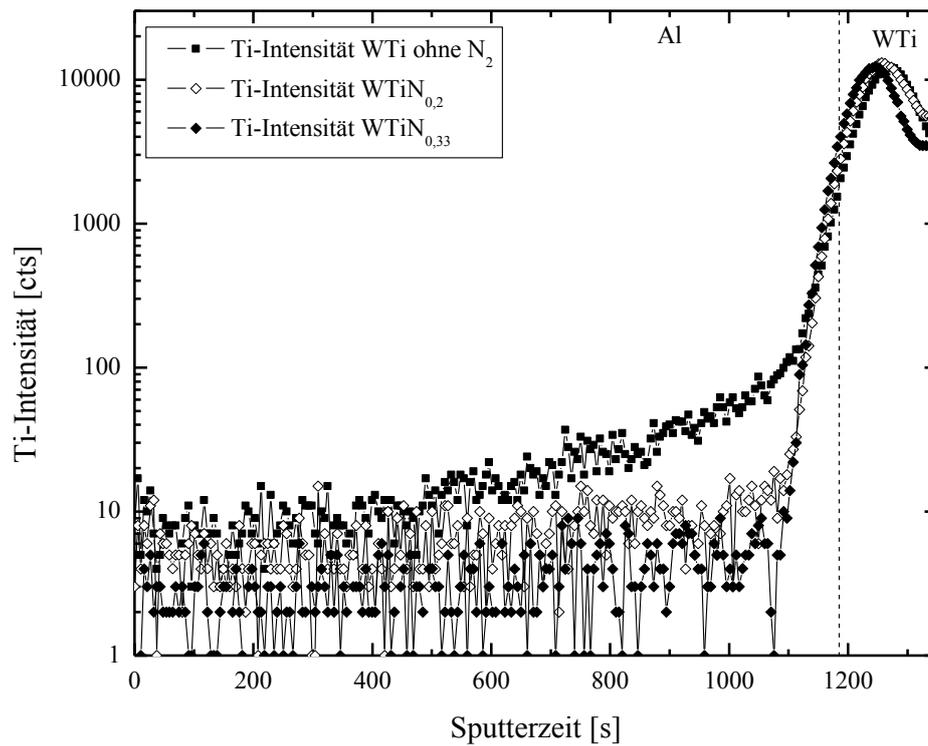


Abbildung 5.38: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h.

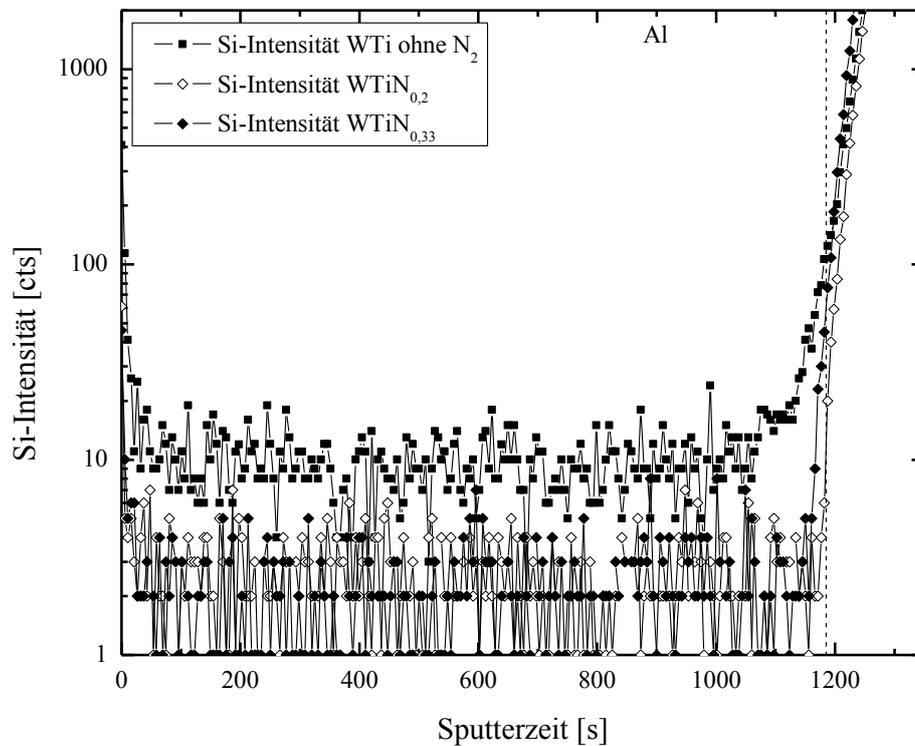


Abbildung 5.39: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Si in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h.

Die reaktiv abgeschiedene WTiN-Barriere zeigt eine sehr gute Langzeitstabilität bei beschleunigten Temperaturtests verglichen mit der nicht nitridierten WTi-Barriere. Da keine Ti-Diffusion bei 400 °C und 16 h mehr zu erkennen ist wurde eine weitere Temperaturbelastung durchgeführt um festzustellen, ab wann die nitridierten Barriersysteme einen Ausfall zeigen. Zu diesem Zweck wurden Spiking- und TOF-SIMS-Tiefenprofilanalysen von Proben durchgeführt, die bei 400 °C für 24 h im HTS-Test waren. Die Ergebnisse sind in Abbildung 5.40 bis Abbildung 5.42 dargestellt. Die Analyse des Al-Spikings liefert dasselbe Ergebnis wie nach HTS-TEST bei 400 °C für 16 h. Die nitridierte Barriere mit dem höheren N₂-Partialfluss zeigt weiterhin keine Al/Si-Diffusion. Die Barriere mit dem geringeren N₂-Anteil ist zwar undicht gegenüber Diffusion geworden, zeigt jedoch eine deutlich verringerte Dichte an Al-Spikes gegenüber der WTi-Barriere ohne N₂. Dies wird auch durch das SIMS-Tiefenprofil in Abbildung 5.42 bestätigt. Die nitridierten Barrieren haben nur sehr wenig bis kein Si im Al. Die N₂-freie Barriere besitzt einen, verglichen mit der 16 h Temperung, deutlich erhöhten Si-Anteil im Al. Am Tiefenprofil von Ti in Al (Abbildung 5.41) ist ersichtlich, dass neben der N₂-freien auch die weniger nitridierte (0,2) WTi-Barriere degradiert. Beide nitridierten Varianten (0,2 und 0,33) zeigen einen erhöhten Ti-Wert im Al. Ein Ti-Verlust in der Barriere selbst ist allerdings nur in der WTiN_{0,2}- und der WTi-Schicht erkennbar. Jedoch scheint dieser Prozess an der WTiN_{0,2} Schicht noch nicht stark genug zu sein, sodass eine hohe Al/Si-Diffusion stattfindet.

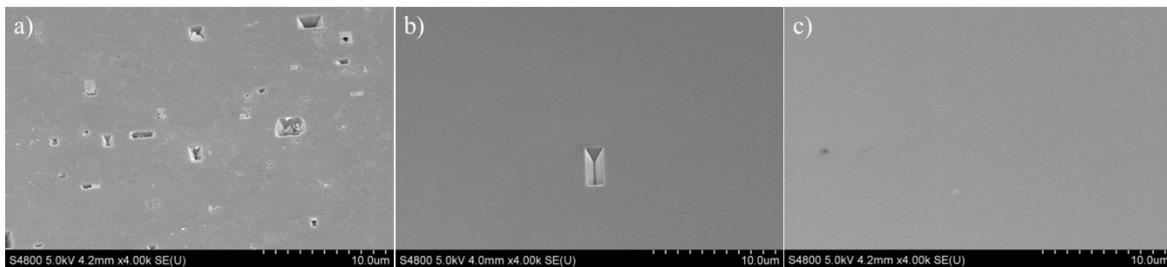


Abbildung 5.40: REM-Aufnahmen von 50 nm dicken WTi-Dünnschichten gesputtert bei 2 kW Leistung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar ohne N₂, b) Ar mit 0,2 N₂-Partialfluss c) Ar mit 0,33 N₂-Partialfluss nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h und Ablösung der Barrierschicht und der Metallisierung.

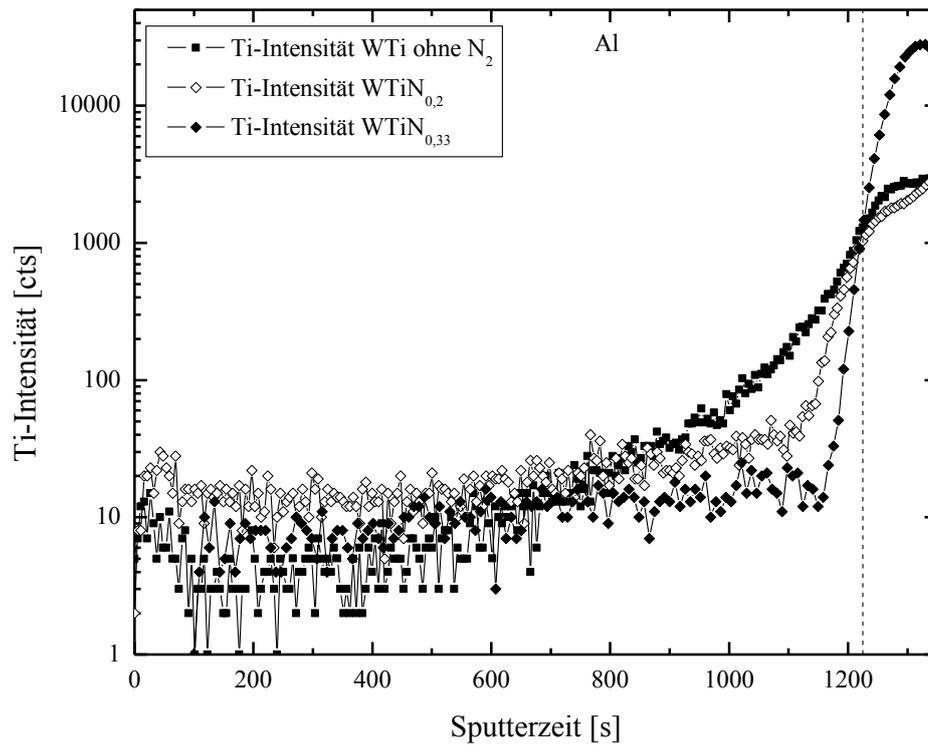


Abbildung 5.41: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h.

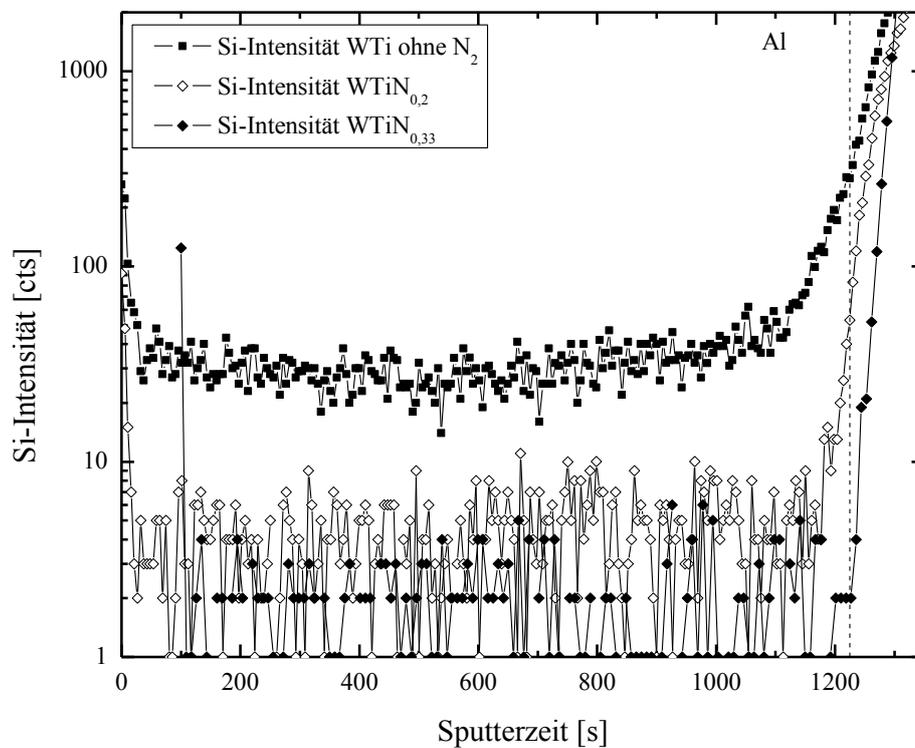


Abbildung 5.42: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Si in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h.

5.5.5 Interpretation der Ergebnisse

Die durchgeführten Temperaturlagerungstests (HTS) mit anschließenden chemischen Analysen von WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren zeigen einen Zusammenhang von Schichtzusammensetzung und Barrierenstabilität. Dieser Zusammenhang ist eine Folge von dem festgestellten Fehlermechanismus. Ti, als ein Bestandteil der Diffusionsbarriere, zeigt eine Affinität zu der aufliegenden Al-Metallisierung und diffundiert ab einer Temperatur von 350 °C in die Metallisierung. Dieser Effekt verstärkt sich, je höher der Ti-Gehalt in der Barrierendünnschicht ist, da ein höheres Konzentrationsgefälle wirkt. Da diese Temperaturbereiche sowohl in, auf der Barrierenabscheidung folgenden, Halbleiterprozessen als auch in nicht zerstören Kurzschlussituation vorkommen können, bedeutet dies im schlechtesten Fall eine Alterung und damit verbundenen Zuverlässigkeitseinschränkung gegenüber Al/Si-Diffusion. Die hergestellten WTiN-Dünnschichten zeigen den Fehlermechanismus der Ti-Diffusion nicht und sind somit langzeitstabilere Al/Si-Diffusionsbarrieren. Das Unterdrücken des Fehlermechanismus ist eine Folge der Bildung von TiN in der Barriere. Das TiN ist reaktionsträger und ist fest im WTiN gebunden. Im Folgenden wird die Integration von WTi- und WTiN-Dünnschichten auf Leistungshalbleitern gezeigt. Dabei liegt der Fokus auf WTi-Barrierenschichten mit geringstmöglichen Ti-Gehalt und reaktiv hergestellten WTiN-Barrierenschichten.

5.6 Herstellung und Charakterisierung von Leistungshalbleitern mit Diffusionsbarriere

5.6.1 Einleitung

In diesem Kapitel wird die Integration der langzeitstabilsten WTi-Diffusionsbarrieren erläutert. Besonders jene WTi-Barrieren mit einem geringen Ti-Gehalt stellen gute und langzeitstabile Diffusionsbarrieren dar. Solche Barrieren können mit Hilfe eines reaktiven Sputterprozesses mit N₂ noch weiter stabilisiert werden, da die Ti-Diffusion und somit der Fehlermechanismus blockiert ist. Die Integration in einen Leistungshalbleiter wird für die in Tabelle 5.7 dargestellten Diffusionsbarrieren mit einer Schichtdicke von 100 nm gezeigt.

Tabelle 5.7: Auswahl der WTi-Barrieren zur Integration in einen Leistungshalbleiter

		Sputtergas	Partialfluss N₂	Sputterdruck	Bias-Leistung
1.	WTi	Ar	0	1x10 ⁻³ mbar	80 W
2.	WTiN	Ar	0,2	1x10 ⁻³ mbar	0 W
3.	WTiN	Ar	0,33	1x10 ⁻³ mbar	0 W

5.6.2 PVD-Sputter-Abscheidung

Die Abscheidung der Diffusionsbarriere und der Metallisierung erfolgte mittels der beschriebenen Parameter aus den Kapiteln 5.3 und 5.4. In Abbildung 5.43 ist die Integration einer 300 nm dicken WTiN-Diffusionsbarriere in einem IGBT-Transistor im Zellenbereich des Emitters dargestellt. Diese Barriere wurde in den vorigen Kapiteln als langzeitstabilste Weiterentwicklung der WTi-Barrieren identifiziert. Wie in Abbildung 5.43 erkennbar ist scheidet sich die die WTiN-Dünnschicht über jegliche Topografien sehr homogen ab. Die Dünnung an den Seitenwänden ist in diesem Fall mit circa 30% tolerabel. Die aufliegende AlCu-Metallisierung zeichnet sich aufgrund hoher Sputterleistung durch gute Konformität aus (Kapitel 5.3.3). Die Korngröße ist mit etwa 500 nm bis 1 µm sehr grobkörnig.

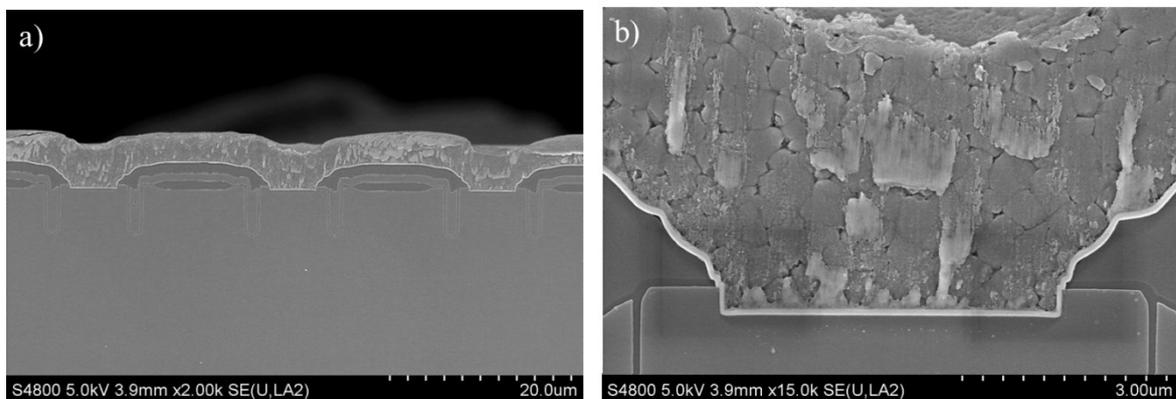


Abbildung 5.43: REM-Abbildungen einer IGBT-Trench-Technologie mit WTiN-Diffusionsbarriere und AlCu-Metallisierung. a) Übersichtsaufnahme der Zellenstruktur und b) Detailaufnahme einer Zelle.

Zu Versuchszwecken wurde die Topografie in den Kontaktlöchern durch eine weitere Vertiefung um das 5-fache erhöht. Das Aspektverhältnis von Breite zu Tiefe beträgt somit 4 zu 1. Im Rahmen dieses Versuchs sollte die Kantenabdeckung auf vertikalen Strukturen von WTi (beschriebene „Standard“-Parameter) getestet werden. In Abbildung 5.44 ist eine REM-Analyse mit einer EDX-Elementmappinganalyse von Ti und W dieser Teststrukturen gezeigt. Zum einen ist deutlich erkennbar, dass WTi selbst auf sehr tiefen und nahezu rechtwinklige Strukturen konform abscheidbar ist. Den Beweis hierfür liefern die EDX-Mappings. Die Ti-Intensität an den Seitenwänden ist deutlich höher als am Kontaktlochboden. An der W-Intensität hingegen ist ablesbar, dass es homogen verteilt ist. Die Erklärung hierfür liefert das bereits erläuterte Rückspattern von Ti. Durch dieses Rückspattern wird Ti von der aufwachsenden Schicht erneut abgetragen. Die Richtung der rückgesputterten Ti-Atome ist nicht gerichtet, sodass Ti auch an die Seitenwand gestreut wird und sich erneut abscheiden kann. Dieses Verhalten bewirkt zum einen, dass die Dünnung der WTi-Schicht an den Seitenwänden gering ist, sich aber zum anderen zusätzlich der Ti-Gehalt erhöht. Im Vergleich dazu zeigt die WTiN-Diffusionsbarriere aus

Abbildung 5.43 eine deutlich stärkere Dünnung an den Seitenwänden. Daher ist davon auszugehen, dass das Rückspütern nicht auftritt. Dies wurde auch in Kapitel 5.3.1 gezeigt. Das Rückspütern reduziert sich durch die Bildung von TiN bei der reaktiven Abscheidung deutlich. Dies ist chemisch an der äquivalenten Stöchiometrie und anhand dieses Ergebnisses an einer erhöhten Dünnung der Barriere an den Seitenwänden sichtbar.

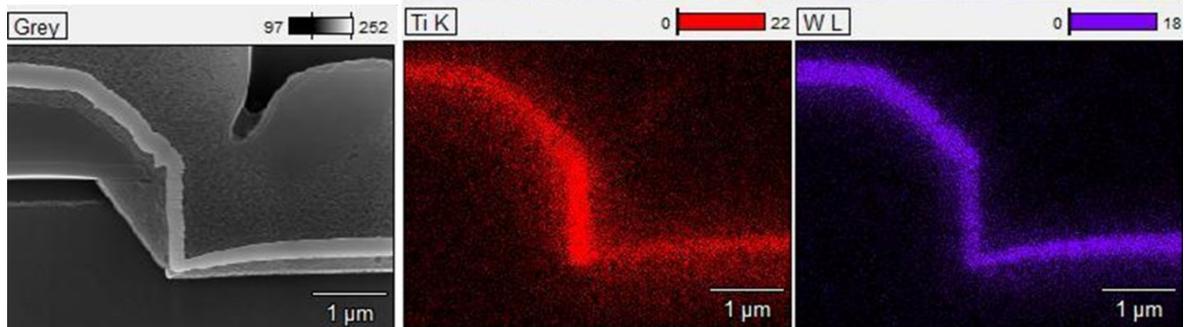


Abbildung 5.44: REM-Analyse und EDX-Elementmapping von Topographiestufen in einem Aspektverhältnis von 4 zu 1 (Breite zu Tiefe) mit WTi als Diffusionsbarriere.

5.6.3 Strukturierung

Zur Herstellung von funktionsfähigen Demonstratoren muss die Barrierschicht, wie auch die Al-Metallisierung, strukturiert werden, um elektrische Potentiale voneinander zu trennen. Die Strukturierung der Barrierschicht kann entweder getrennt von der Al-Metallisierung oder gemeinsam erfolgen. Im Nachfolgenden wird die gemeinsame Strukturierung der Barrierschicht und der Metallisierung als „in situ“ und die getrennte Strukturierung als „ex situ“ bezeichnet. Dies folgt aus der Art der Abscheidung und der Strukturierung. In Abbildung 5.45 sind die beiden Arten der Strukturierung schematisch und deren Endergebnis als REM-Aufsicht dargestellt. Die zugehörigen Prozessschritte werden in Tabelle 5.8 benannt. Die ex situ Strukturierung ist mit den Prozessschritten A.1 bis A.5 beschrieben. Nach der Schichtabscheidung von WTi(N) wurde ein Fotolack für den zu schützenden Bereich aufgebracht. Die Barrierschicht wurde anschließend geätzt und der Lack abgelöst. Die Ätzung der Barriere ist hierbei anisotrop dargestellt, da im Rahmen der Untersuchung eine trockenchemische Methode gewählt wurde. Danach folgte die Abscheidung der AlCu-Metallisierung, deren zu schützender Bereich auch von einem Lack abgedeckt wurde. Das Ätzen der AlCu-Schicht mit anschließender Lackentfernung war der letzte Schritt der Strukturierung. Das Ätzprofil fiel in diesem Fall isotrop aus, da es im Rahmen der ex situ Strukturierung nasschemisch durchgeführt wurde. Als Ergebnis entwickelte sich eine Art Stufe der Metallisierung. Dies resultierte aus der Verwendung der identischen Maske für die Lithographie der Barrierschicht und der Metallisierung. Die

Verbindung aus anisotroper Ätzung der Barrierenschicht und isotroper Ätzung der Metallisierung ergab vom Fußpunkt der Metallisierung bis zur Barrierenkante einen ungefähren Abstand, welcher der Metallisierungsdicke gleicht.

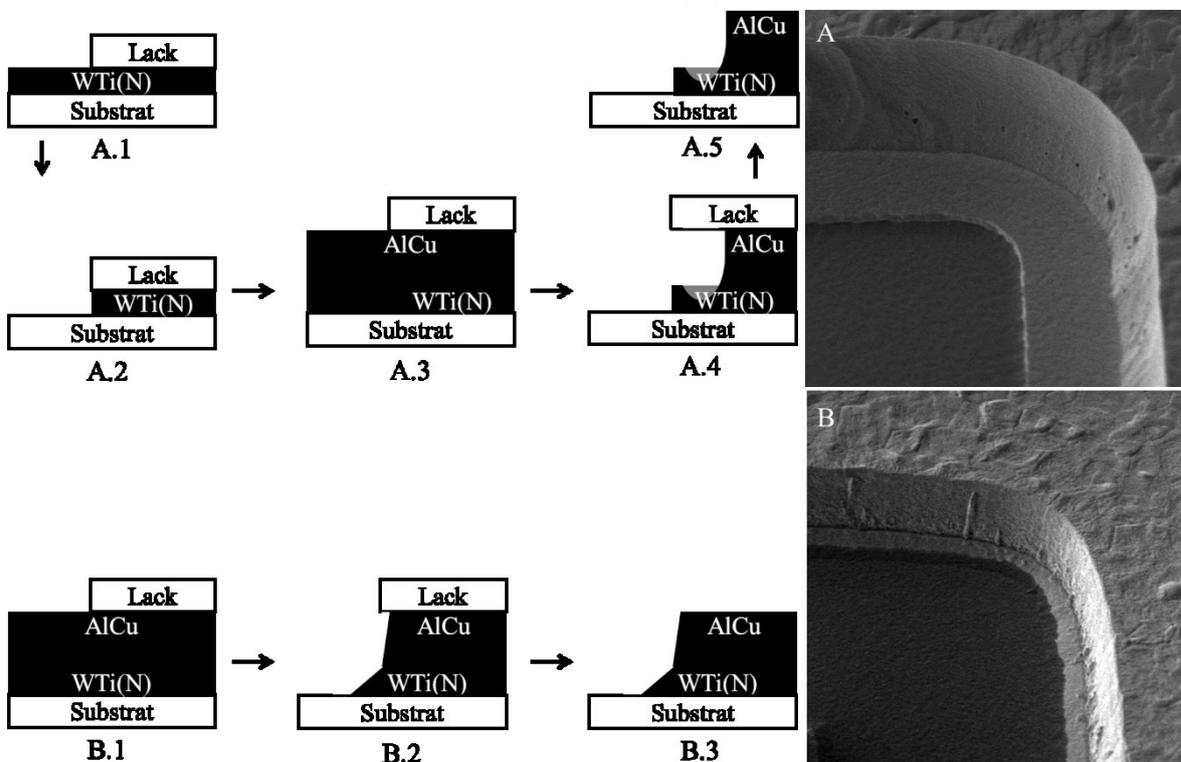


Abbildung 5.45: Schematische und REM-Darstellung der Strukturierungsmöglichkeiten der Barrieren- und Metallisierungsschicht am Beispiel von WTi(N) und AlCu auf einem Leistungshalbleiter.

Tabelle 5.8: Prozessschritte der Strukturierungsmethoden A und B aus Abbildung 5.45

	Methode A: ex situ	Methode B: in situ
A.1	- WTi(N)-Schichtabscheidung - Lithographie	B.1 - WTi(N)-Schichtabscheidung - in situ AlCu-Schichtabscheidung - Lithographie
A.2	- Ätzen WTi(N)	B.2 - Ätzen WTi(N) - in situ Ätzen AlCu
A.3	- Lackablösen - Abscheidung AlCu - Lithographie	B.3 - Lackablösen
A.4	- Ätzen AlCu	
A.5	- Lackablösen	

Die in situ Strukturierung ist mit den Prozessschritten B.1 bis B.3 beschrieben. Als erstes wurde die gesamte Metallisierung inklusive der Barrierenschicht abgeschieden. Im

Idealfall geschieht dies ohne Vakuumunterbrechung in der gleichen Sputteranlage jedoch in getrennten Kammern. Anschließend wurde der Fotolack aufgebracht um, die zu schützenden Bereiche abzudecken. Die Ätzung der gesamten Schicht fand ohne Vakuumunterbrechung in einer Anlage statt. Mit Blick auf das Gesamtergebnis in der REM-Vergrößerung fällt auf, dass das Ätzbild der Metallisierungskante aufgrund der hohen Gesamtdicke ($\approx 3,5 \mu\text{m}$) nicht ideal anisotrop ist. Für die Ätzkante des WTi und WTiN gilt Ähnliches, da in diesem Verfahren die Ätzrate der WTi/WTiN-Schicht sehr niedrig war.

Beide Strukturierungsarten ergaben keine Unterätzungen der Barrierenschicht. Aufliegende Passivierungssysteme können sich konform abscheiden und die Metallisierung optimal vor Korrosionen bzw. Oxidationen schützen. Der Nachteil des ex situ Verfahrens liegt in der möglichen Grenzflächenbildung zwischen WTi und AlCu. In Abbildung 5.46 ist eine TEM-Analyse der WTi-Schicht in Verbindung mit AlCu dargestellt. Die Strukturierung und Abscheidung wurden ex situ durchgeführt. An dem markierten Bereich des TEM-Bildes wurde ein EDX-Linescan durchgeführt. Bei Betrachtung der Sauerstofflinie im EDX-Linescan ist erkennbar, dass sich an der Grenzfläche der Sauerstoffanteil erhöht. Dies ist auf eine Oxidation des WTi zurückzuführen. Eine solche Oxidation kann im Extremfall zu schlechter Haftung oder erhöhten elektrischen Spannungsabfällen führen.

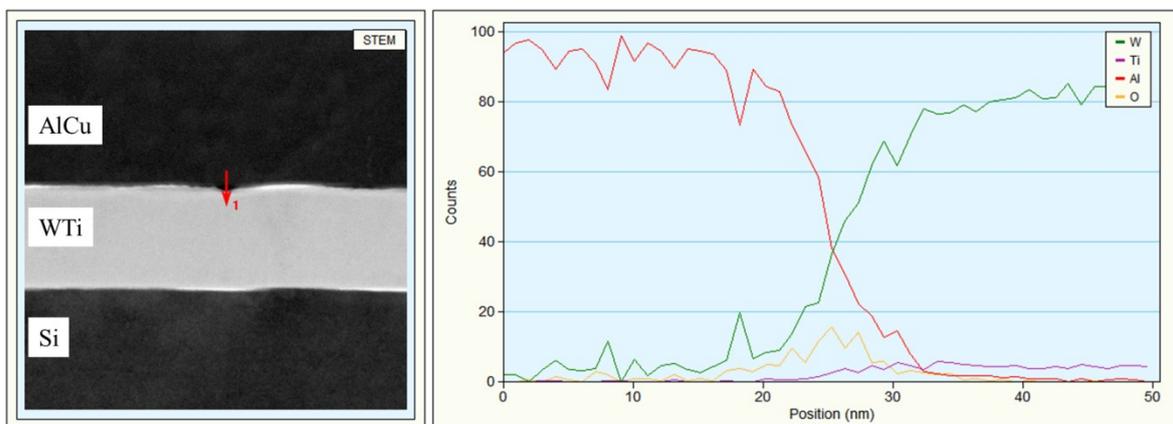
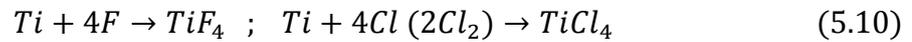
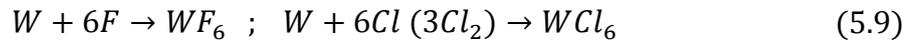


Abbildung 5.46: TEM-Analyse mit EDX-Linescan über die Al/WTi-Grenzfläche, die über einen ex situ Prozess strukturiert wurde.

Die Ätzung des WTi wurde sowohl bei der in situ als auch bei der ex situ Abscheidung trockenchemisch durchgeführt. Als reaktive Gase wurden Fluor- und Chlor-Verbindungen gewählt, da diese sowohl mit Ti als auch mit W reagieren [79]. Das Fluor wurde aus der Verbindung Tetrafluormethan (CF_4) für die Ätzung gewonnen. In einem Plasma wird Fluor in Form eines Radikals abgespalten, was dazu führt dass es deutlich reaktiver als in molekularer Form ist. Chlor wird in Form von Chlorgas (Cl_2) eingebracht und wie das Fluor in einem Plasma gespalten. Die Reaktion geschieht sowohl durch das Cl_2 -Molekül als auch durch im Plasma entstehende Cl-Radikale [80]. Die Reaktionen von F und Cl mit

W und Ti können formal über die Reaktionsgleichungen 6.9 und 6.10 beschrieben werden [81] [82].



Im Rahmen dieser Untersuchung wurden beide Präkursorgase verwendet. Die Ätzrate des fluorhaltigen Gases ist höher, da F auch mit Titanoxid (TiO₂) respektive unstöchiometrischen Titanoxiden (Ti_xO_y) reagiert. Diese Reaktion findet mit Cl erst bei höheren Temperaturen und langsamer statt [81]. Aufgrund produktionstechnischer Vorgaben wurde für die ex situ Ätzung CF₄ und für die in situ Ätzung Cl₂ als reaktives Gas benutzt. Um die Ätzung zu kontrollieren und den Endpunkt zu bestimmen wurde in beiden Fällen während der Ätzung das Emissionsspektrum im Plasma interferometrisch bestimmt.

Die Ätzung des AlCu kann wie beschrieben trockenchemisch oder nasschemisch erfolgen. Bei der trockenchemischen Ätzung dient eine Mischung aus Cl₂ und Bortrichlorid (BCl₃) als reaktives Gas [58] [80]. Die Reaktionsgleichung kann formal über Gleichung (5.11) beschrieben werden.



Der Zusatz von BCl₃ dient zum Abtragen des nativen Oxids an der Aluminiumoberfläche und des Cu-Anteils in der Metallisierung. In Abbildung 5.47 ist die Ätzkurve anhand des Emissionsspektrums für die in situ Ätzung von 3,2 µm AlCu und 300 nm WTi gezeigt. Die Ätzzeiten < 220 s repräsentieren die Ätzung des AlCu. Die Emissionswellenlänge von 261 nm stellt dabei die Strahlung von Al₂Cl₆ dar. Ab circa 20 s ist das Plasma gezündet und die Ätzung von AlCu startet. Nach einem kurzen Einschwingen ist die Emission konstant. Die Ätzung des AlCu findet mit einer Ätzrate von circa 16 nm/s statt. Ab einer Ätzzeit von circa 220 s ist ein Ansteigen der TiCl₄-Emissionslinie bei 703 nm zu erkennen. Dies beschreibt die Ätzung des WTi. Sie steigt bis zu einem Peak an und flacht dann erneut ab. Da es sich um eine Grenzfläche handelt, ist dieser Anstieg kein Sprung auf den Ti-Peak. Zudem wird während der Ätzung des WTi auch AlCu über die Seitenwände weiter geätzt. Dies ist zum einen an der langsam abflachenden Ätzkurve aber auch an der Kante des AlCu in Abbildung 5.45 zu erkennen. Ab einer Ätzzeit von circa 280 s beginnt die Überätzung. Sie ist notwendig für ein restefreies Ätzbild. WTi und AlCu werden nur noch über die Seitenwände geätzt. Dies ist z.B. an der im Vergleich zur Al-Ätzung höheren TiCl₄-Linie zu erkennen. Die Ätzcharakteristik des WTi kann mit Vernachlässigen der Al-Ätzkurve auch für die ex situ Ätzung hergenommen werden. Zudem ist für die Ätzung des reaktiv gesputterten WTiN kein Unterschied in der Ätzrate oder Selektivität zu erkennen.

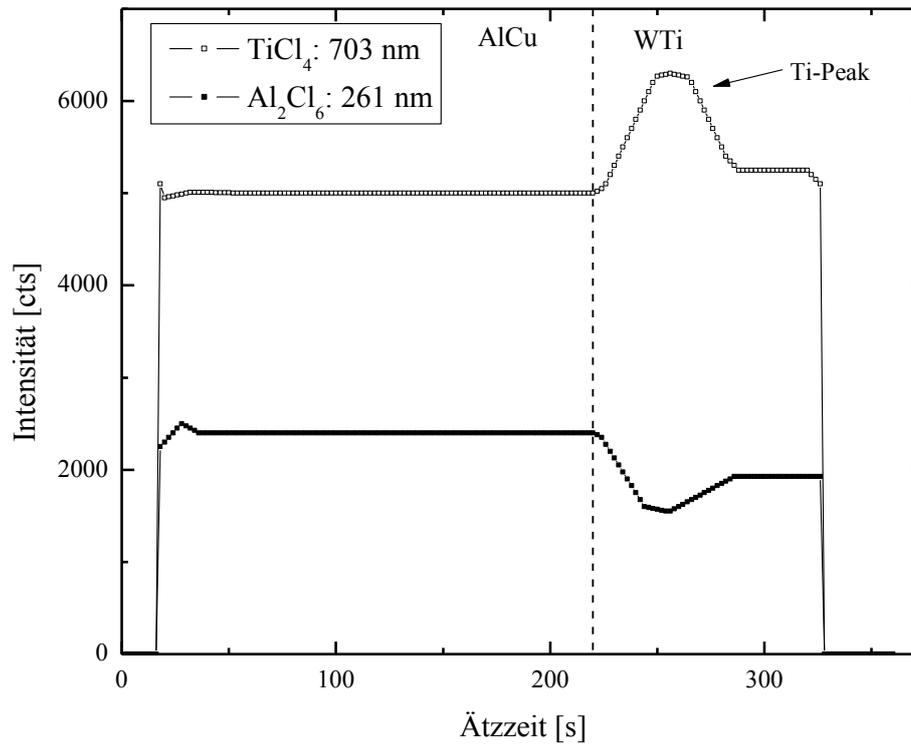


Abbildung 5.47: Emissionsspektrum der Ätzung von 3 µm AlCu und 100 nm WTi.

Der nasschemische Ätzprozess während des ex situ Prozesses findet in einem Medium aus Salpetersäure (HNO_3) und Phosphorsäure (H_3PO_4) statt. Dabei dient das HNO_3 als Oxidationsmittel für das Al und H_3PO_4 schließlich als Lösemittel für das Al_2O_3 [83]. In Abbildung 5.45 ist zu erkennen, dass diese Form der Ätzung anisotrop abläuft.

5.6.4 Elektrische Eigenschaften

Es werden die elektrischen Eigenschaften von Leistungshalbleitern gezeigt, welche durch die Integration einer Diffusionsbarriere verändert werden. Die Messung der elektrischen Parameter wurde an Wafern durchgeführt, die mit der in situ Strukturierung prozessiert wurden, um die beschriebenen Nachteile zu eliminieren. Am Ende dieses Kapitel wird der Einfluss der ex situ Strukturierung auf die elektrischen Parameter gezeigt. Anhand dieser Ergebnisse wird ein Lösungsansatz für die ex situ Prozessierung erarbeitet.

Infolge des Einsatzes einer Diffusionsbarriere fällt Al als direktes Kontaktmaterial zu dotierten Gebieten im Halbleiter weg. Al besitzt eine p-dotierende Wirkung, sodass der Kontaktwiderstand auf p-dotierten Halbleitern sehr gut ist. Ähnlich gute Kontaktwiderstände können auf n-dotierten Gebieten nur über weitaus höhere Dotierkonzentrationen erreicht werden (Abbildung 3.9). Es ist zu erwarten, dass der

Einsatz einer Diffusionsbarriere als direktes Kontaktmaterial einen großen Einfluss auf den Kontaktwiderstand besitzt. Der relative Kontaktwiderstand für WTi- und WTiN-Barrieren im Vergleich zu AlSiCu-Metallisierungen ist in Abbildung 5.48.a zu hochdotierten p-, und in Abbildung 5.48.b zu hochdotierten n-Gebieten gezeigt. Der Wert 1 auf der Ordinate besagt, dass der Kontaktwiderstand identisch mit dem Wert der AlSiCu-Metallisierung ist. Werte <1 beschreiben einen geringeren und Werte über 1 einen erhöhten Kontaktwiderstand.

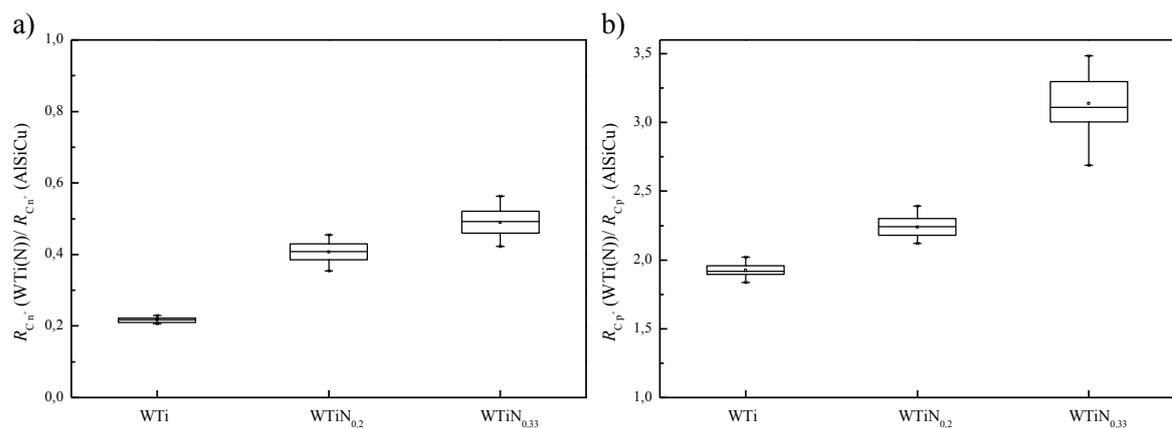


Abbildung 5.48: Relative Kontaktwiderstände auf a) n-dotiertem Bereich und b) p-dotiertem Bereich von WTi, WTiN_{0,2} und WTiN_{0,33} im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung

In Abbildung 5.48.a ist zu erkennen, dass die Kontaktwiderstände auf hoch dotierten n-Gebieten im Vergleich zu AlSiCu deutlich sinken. Sie betragen bei WTi nur noch 20%, bei WTiN_{0,2} 40% und bei WTiN_{0,33} 50% des Kontaktwiderstands von AlSiCu. Dies ist auf die p-dotierende Wirkung des Al zurückzuführen. Al kontaktiert n-dotierte Bereiche deutlich schlechter an als andere Metalle, da es eine intrinsische Gegendotierung bewirkt, die nur über eine hohe Fremstoffdotierung ausgeglichen werden kann. Dies bestätigen auch die Resultate der Ta- und TaN-Dünnschicht in Kapitel 7.1. In Abbildung 5.48 fällt außerdem auf, dass die Stickstoffaddition im WTi den Kontaktwiderstand sowohl auf n- als auch auf p-Dotierung erhöht. Verglichen mit der WTi-Dünnschicht ohne Stickstoff erhöht sich der Kontaktwiderstandswert bei stickstoffhaltigen Barrieren um den Faktor 2 - 2,5. Dies ist auf die bereits beobachtete Leitfähigkeitsreduzierung an den WTiN-Barrieren zurückzuführen (Kapitel 5.3.1). Das identische Verhalten ist auch auf hoch dotierten p-Gebieten in Abbildung 5.48.b zu erkennen. Aufgrund der Stickstoffaddition steigt der Kontaktwiderstand des Materials. Die relative Betrachtung im Vergleich zum AlSiCu demonstriert die außerordentlich gute Kontaktierung des Al an p-dotierte Halbleiterbereiche. Die WTi-Dünnschicht besitzt im besten Fall einen doppelt so hohen

Kontaktwiderstand. Am Beispiel des $\text{WTiN}_{0,33}$ ist erkennbar, dass dieser bis zu einem Faktor 3 ansteigen kann.

Der Einsatz von WTi besitzt zudem einen geringen Einfluss auf den Spannungsabfall am eingeschalteten IGBT-Transistor und ist in Abbildung 5.49 gezeigt. Durch den Einsatz einer Diffusionsbarriere ohne Stickstoffzusatz verringert sich der Durchlassverlust durchschnittlich um circa 3%. Bei den nitridierten Varianten des WTi tendiert der durchschnittliche Wert wieder zurück zu dem Wert wie für die AlSiCu-Metallisierung. Diese Eigenschaft ist eine Folge des verbesserten Kontakts zu n^+ -Gebieten. Der Unterschied ist allerdings sehr gering und liegt im Rahmen der Messungenauigkeit, was an den oberen und unteren Quantilen und Antennen der *Box-Whisker*-Plots erkennbar ist. Der Metall/ Halbleiter-Kontakt besitzt nur einen geringen Anteil am gesamten Spannungsabfall über das Bauteil hinweg. Die meisten Verluste entstehen bei Leistungshalbleitern trotz Ladungsträgerüberschwemmung im niedrig dotierten Substrat. Wenn überhaupt notwendig, dann kann der Mittelwert über eine Implantationsdosisanpassung des n^+ -Gebietes nachjustiert werden.

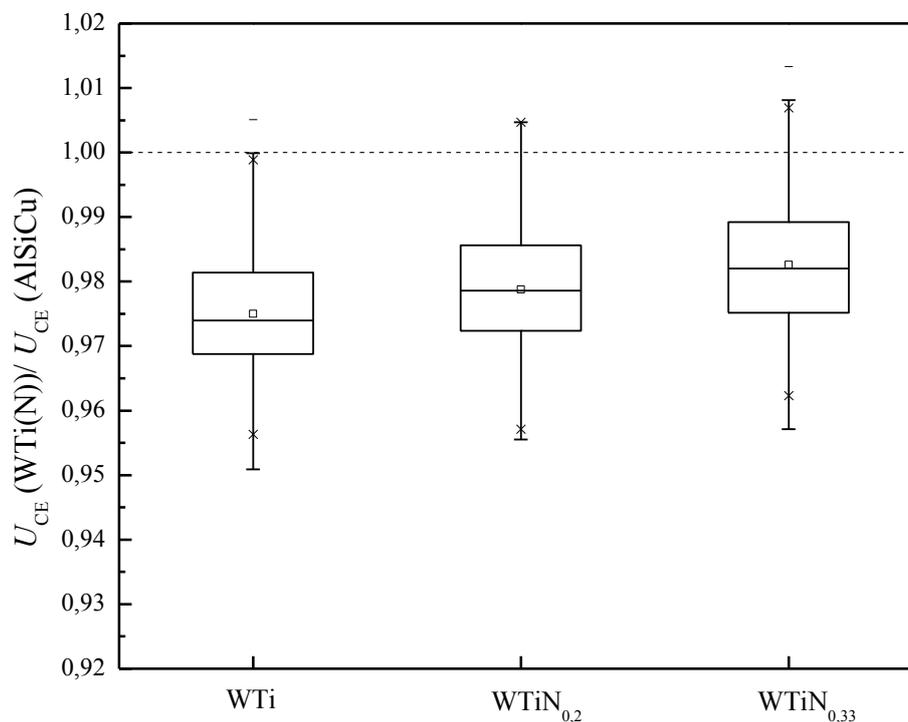


Abbildung 5.49: Relativer Spannungsabfall über einem IGBT-Transistors bei Nennstrom und Verwendung von WTi-, $\text{WTiN}_{0,2}$ - und $\text{WTiN}_{0,33}$ -Barrieren mit AlCu verglichen mit AlSiCu als Metallisierung.

Der verbesserte Kontakt auf n^+ -Gebieten ist deutlicher an der Einsatzspannung (U_{GEth}) abzulesen. Dieser Parameter beschreibt bei welcher Spannung der Kollektorstrom anfängt

zu fließen. Das Verhalten der Einsatzspannung bei Verwendung WTi und WTiN-Barrieren ist in Abbildung 5.50 dargestellt. Bei der Verwendung der WTi-Barriere ohne Stickstoffzusatz sinkt der Wert. Das bedeutet, dass der Transistor bei einer geringeren Spannung einschaltet. Dies ist auch auf den verbesserten n^+ -Kontaktwiderstand zurückzuführen. Durch den verbesserten n^+ -Kontakt entsteht früher ein Elektronenkanal unter dem Gateoxid. Das gleiche Verhalten ist auch bei der Verwendung von den nitridierten Barrieren sichtbar. Durch den höheren Kontaktwiderstand auf n^+ -Gebieten steigt die Einsatzspannung im Vergleich zu der stickstofffreien Barriere, ist jedoch unter dem Wert der Einsatzspannung bei Verwendung von AlSiCu. Dieser grundsätzliche Unterschied kann über eine Erhöhung der Implantationsdosis der p-Wanne ausgeglichen werden. Hierdurch wird der Bildung des Kanals entgegengewirkt, sodass der Wert der Einsatzspannung angehoben wird.

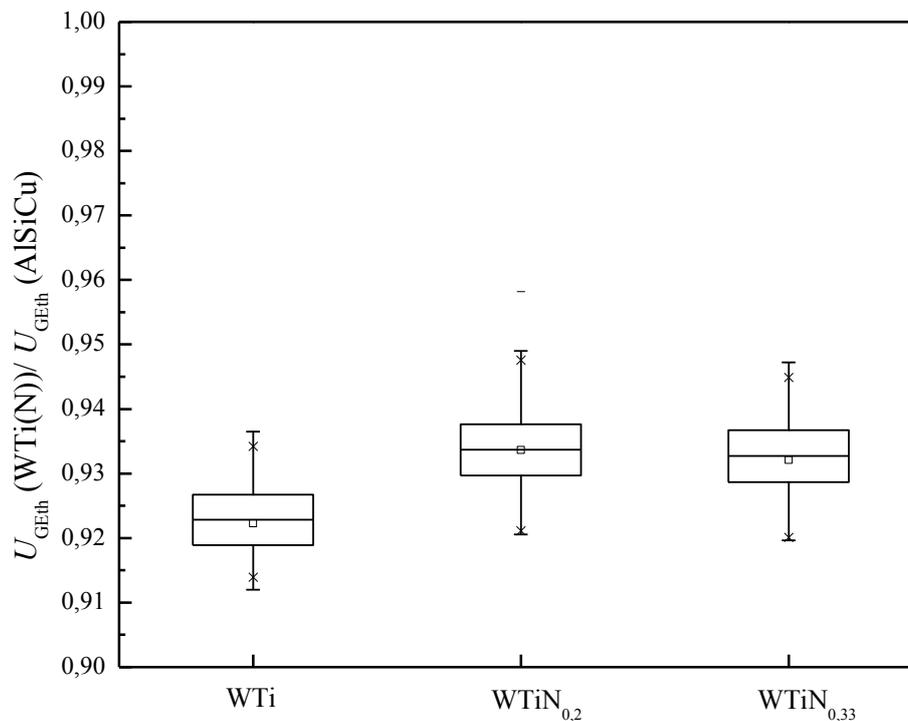


Abbildung 5.50: Relative Einsatzspannung eines IGBT-Transistors bei Verwendung von WTi-, WTiN_{0,2}- und WTiN_{0,33}-Barrieren mit AlCu verglichen mit AlSiCu als Metallisierung.

Der elektrische Kontakt von WTi und WTiN wurde auf hochdotierten n- und p-Gebieten untersucht. Auf diesen hochdotierten Gebieten wird der Kontakt über Feldemission hergestellt. Die WTi-Verbindungen mit AlCu als Metallisierung kontaktieren n-dotierte Bereiche deutlich besser und p-dotierte Bereiche schlechter als eine Standard-AlSiCu-Metallisierung. Diese Veränderung wirkt sich an den gemessenen Parametern zwar aus, ist

jedoch mit geringer Veränderung der Implantationsdosis anpassbar. An niedriger dotierten p-Schichten kann das Verhalten der höheren Kontaktwiderstände jedoch zu Problemen führen. Wird die Dotierkonzentration an der Kontaktfläche soweit herabgesetzt, dass ein *Schottky*-Kontakt entsteht, kann dies größeren Einfluss auf die Durchlassverluste und sogar die Sperrfähigkeit haben. Wird der Kontaktwiderstand des p-Gebiets durch die schlechte Ankontaktierung sehr hoch so kann es zum *latch up* des Transistors kommen. In diesem Fall würde der Spannungsabfall unter der n⁺-Source zu hoch werden und der parasitäre Thyristor zündet.

Falls keine hoch dotierten Halbleitergebiete zur Kontaktierung benutzt werden können, kann der Kontakt auch über Silizide hergestellt werden [12]. Je nach Kontaktierung eines p- oder n-Bereichs können Silizide gewählt werden, um die effektive *Schottky*-Barrierrhöhe herabzusetzen [49] und einen ohmschen Kontakt zu ermöglichen.

Neben der reinen Kontaktierung zu p- und n-Silizium sind die elektrischen Eigenschaften auch von der Prozessierung und den daraus entstehenden Grenzschichten abhängig. Bei der Abscheidung und Strukturierung mit dem *in situ* Prozess sind keine Grenzschichten zwischen Metall und Diffusionsbarriere zu erwarten. Im Kapitel 5.6.3 zur Strukturierung und in Abbildung 5.46 wurde die Bildung von oxidierten Oberflächen an der Grenzschicht zwischen Barriere und Metallisierung gezeigt. Eine solche Grenzschicht kann bei der *ex situ* Abscheidung entstehen. Zum einen ist die Barrierenmetallisierung der Reinraumluft ausgesetzt und es kann ein natives Oxid darauf gebildet werden. Zum anderen kann ein dickeres Oxid durch eine Sauerstoffplasmabehandlung entstehen. Im Kapitel 5.6.3 wird beschrieben, dass die WTi- und WTiN-Barriere plasmachemisch geätzt wird und der Lack daraufhin entfernt wird. Diese Lackablösung findet häufig in der Plasmaätzanlage statt. In diesem Prozess wird der Lack mit Hilfe eines Sauerstoffplasmas quasi verbrannt (*strip off*). Wird dieser *strip*-Prozess auf der WTi-Barriere angewendet, so entstehen dichte Ti- und W-Oxide an der Grenzfläche zum Metall (Abbildung 5.46). In den elektrischen Parametern wird durch die Oxidgrenzschicht ein serieller Widerstand eingebaut. Dieser Fehler in der Prozessierung wird durch eine Erhöhung an den Kontakt-, Durchlass- und Gatewiderständen sichtbar. In Abbildung 5.51 sind diese Parameter für die *in situ* und *ex situ* Strukturierung von WTi gezeigt. Die elektrischen Werte sind dabei relativ zu den Werten der AlSiCu-Referenzgruppe zu verstehen. Der relative Wert 1 bedeutet, dass der Wert identisch mit dem AlSiCu-Wert ist. Werte > 1 repräsentieren eine Erhöhung und Werte < 1 eine Verringerung.

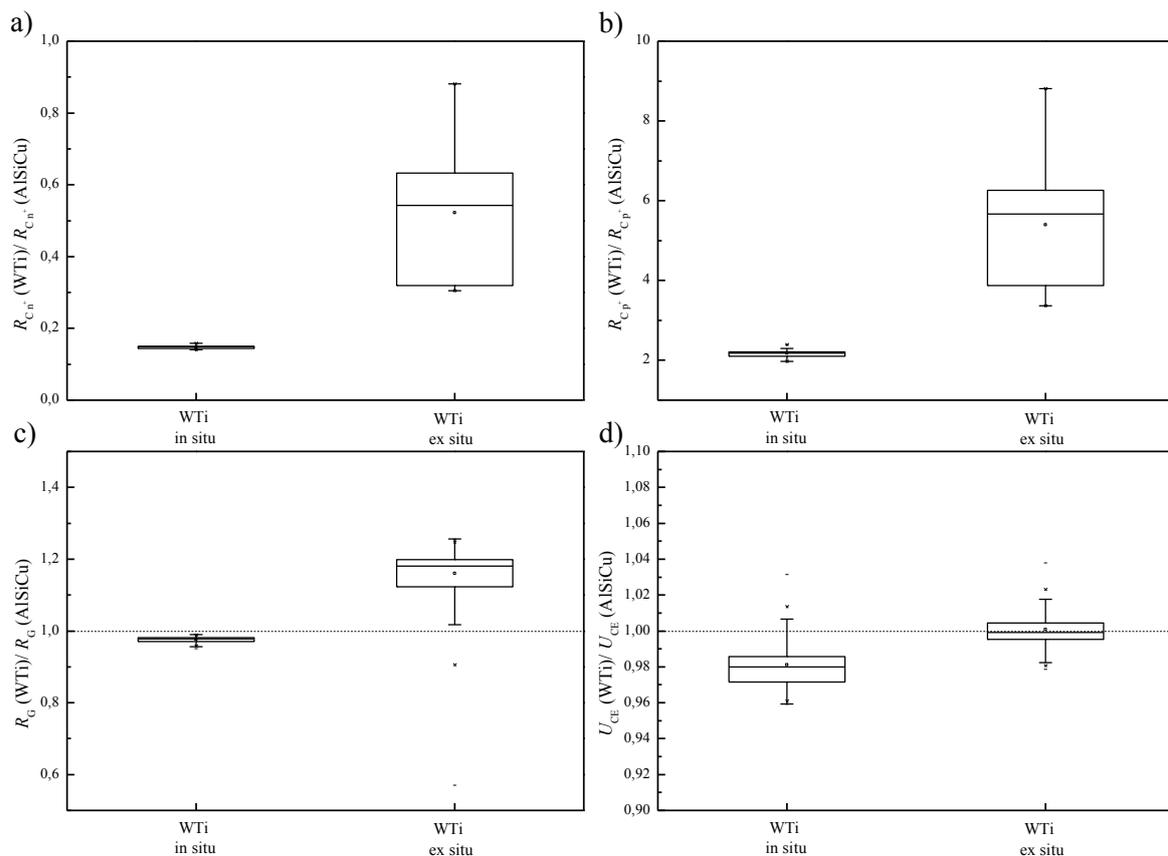


Abbildung 5.51: Einfluss der ex situ Abscheidung mit einer Lackablösung durch Sauerstoffplasma auf a) den Kontaktwiderstand auf n⁺-Si (R_{Cn+}), b) den Kontaktwiderstand auf p⁺-Si (R_{Cp+}), c) den Gatewiderstand (R_G) und d) den Spannungsabfall über den IGBT-Transistor (U_{CE}).

In Abbildung 5.51.a und Abbildung 5.51.b sind die Kontaktwiderstände auf p⁺- und n⁺-Gebieten dargestellt. Das generelle Verhalten der Verringerung der Kontaktwiderstände auf n⁺ und die Erhöhung auf p⁺ sind bereits bekannt. Der Vergleich untereinander bestätigt allerdings eine deutliche Erhöhung der Kontaktwiderstände für die ex situ Abscheidung sowohl auf p⁺- als auch auf n⁺-Gebieten. Weiterhin ist die hohe Streuung der Werte für die ex situ Abscheidung auffällig. Die deutet auf einen nicht zu kontrollierenden und über den Wafer ungleichmäßig stattfindenden Prozess hin. Die hohe Streuung und die Erhöhung sind auch für den Gatewiderstand (R_G) in Abbildung 5.51.c zu erkennen. Das Gate wird typischerweise mit n-dotiertem Polysilizium hergestellt. Trotz der n-Dotierung kommt es hierbei zu einer Erhöhung des Kontaktwiderstands zu Polysilizium für die ex situ hergestellte Barrierenmetallisierung. Die Folge ist in diesem Fall ein erhöhter Gatewiderstand (R_G). In Abbildung 5.51.d ist der Spannungsabfall über das Bauelement gezeigt. Obwohl der Kontaktwiderstand nur geringfügig am Gesamtverlust beteiligt ist, ist der Unterschied zwischen der in situ und ex situ Abscheidung zu deutlich erkennbar. Dies ist auch auf den seriellen Widerstand in Folge der sich bildenden Oxidschicht

zurückzuführen. Alle beschriebenen Probleme der ex situ Strukturierung können mit einer Prozessänderung abgestellt werden. Die Lackablösung muss nasschemisch ohne O₂-Plasma erfolgen und die Werte sind identisch mit denen der in situ Strukturierung. Das native Oxid hat aufgrund der geringen Schichtdicken keinen Anteil an Veränderungen der elektrischen Parameter. Vielmehr ist davon auszugehen, dass diese Oxidschicht während des AlCu-Sputterprozesses von der kinetischen Energie der auftreffenden Al-Atome zerstört wird.

Die beschriebenen Unterschiede der elektrischen Parameter je nach Strukturierungs- und Abscheidemethode sollen demonstrieren, dass die elektrischen Charakteristika nicht zwangsläufig nur von der Diffusionsbarriere beeinflusst werden. Das Integrieren einer zusätzlichen Schicht in ein Halbleiterbauelement erfordert neben der Barrierenentwicklung auch eine Entwicklung des Gesamtprozesses.

5.6.5 Bondbarkeit

Die Haftung der Barriere und der Metallisierung auf einem Leistungshalbleiter wurde mit Hilfe von Bondversuchen bewertet. Wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, können im Bondprozess Fehler auftreten. Solche Fehler sind z.B. die Zerstörung elektrisch isolierender Schichten, das Delaminieren der Metallisierung vom Halbleiter (*metal lift off*, MLO) oder Kraterausbrüche (*cratering*). Die Metallablösungen und Kraterbildungen sind Fehlermodi, die innerhalb der chipseitigen Metallisierung auftreten und auf eine schlechte Haftung der Metallisierung oder der Barrierenschicht hindeuten.

Um die Bondrobustheit bewerten zu können wurden die Halbleiterchips auf dem Wafer singuliert und auf ein keramisches Substrat (Al₂O₃) mit Cu-Metallisierung (300 µm) gelötet. Als Lot diente ein bleifreies Zinn-Silber-Lot (SnAg). Ein solches fertiggestelltes Substrat ist in Abbildung 5.52 dargestellt. Auf den aufgelöteten Halbleitern wurden daraufhin die Bondtests durchgeführt.



Abbildung 5.52: Keramisches Substrat mit aufgelötetem IGBT-Barrierenchip.

Die Bondversuche wurden sowohl mit einem Al- ($\varnothing=350\ \mu\text{m}$) als auch mit einem AlMg0,5-Draht ($\varnothing=400\ \mu\text{m}$) durchgeführt. Nach dem Bonden wurden die Bondausfälle bewertet und die Ausfallrate bestimmt. Es wurden je Metallisierungsgruppe 350 Bondungen durchgeführt. An 25 Bonddrähten aus jeder Testgruppe wurden zudem Schertests durchgeführt. Als Messgerät wurde ein Nordson Dage 4000 unter Berücksichtigung der JEDEC-Norm verwendet [84].

Die ersten Tests wurden mit einem Al Draht ($\varnothing=350\ \mu\text{m}$), einer Bondkraft von 700 cN und einer Ultraschalleistung von 100 W durchgeführt. In einem Versuchsumfang von circa 1000 Bondungen auf der AlCu-Metallisierung mit den Varianten der WTi- und WTiN-Barrieren war kein Bondfehler zu erkennen. Im Vergleich dazu ist die Ausfallrate einer AlSiCu-Metallisierung mit identischen Bondparametern im sub %-Bereich einzuordnen. Die Scherkräfte betragen sowohl bei den Barrierenvarianten als auch bei der AlSiCu-Metallisierung circa 2550 cN. Um die Bondverbindung und die Metallisierungssysteme verschärft zu testen, wurden die Tests mit einem deutlich härteren Al0,5Mg-Draht (400 μm) und höheren Bondkräften und Leistungen durchgeführt, sodass eine höhere Bonddrahtverformung erzielt werden kann. Die Bondkräfte und Leistungen wurden im Vergleich zum Al-Drahtbonden circa um den Faktor 2 erhöht und betragen 1400 cN Bondkraft respektive 175 W Ultraschalleistung.

In Abbildung 5.53 sind die Scherkraftmessungen von Al0,5Mg-Bonddrähten auf unterschiedlichen Metallisierungssystemen dargestellt. Als Metallisierungssysteme wurden die langzeitstabilsten WTi-Barrieren mit AlCu als Metallisierung mit einer AlSiCu-Metallisierung verglichen. An den Scherkraftmessungen waren keine Unterschiede oder Gruppenbildungen zu erkennen. Alle gescherten Bonddrähte hafteten sehr gut. Die durchschnittliche Scherkraft betrug etwa zwischen 4100 und 4300 cN. Dies sind, verglichen mit den Vorgaben aus der JEDEC-Norm (1300 cN), sehr hohe Werte [84]. Diese hohen Scherkräfte zeigen eine überaus gute Verbindung zwischen Bonddraht und Chipmetallisierung. Dies gilt selbst für die minimalen Scherkraftwerte der jeweils 25 Messungen, die mit einem Ausreißer nicht unter 3500 cN Restscherkraft betragen.

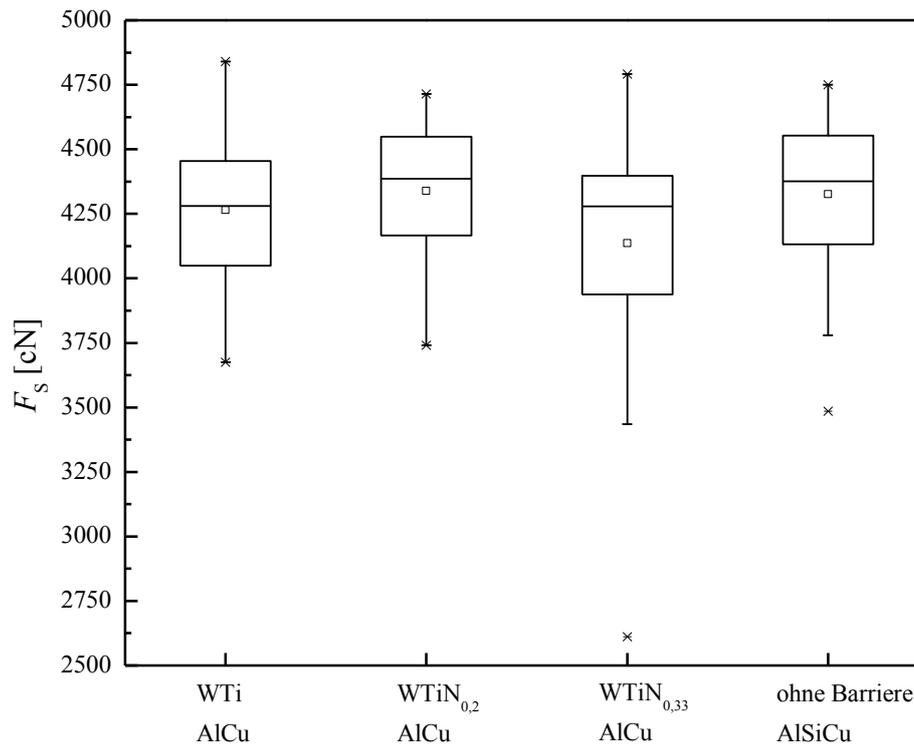


Abbildung 5.53: Scherwerte von Al_{0,5}Mg-Bonddrähten auf unterschiedlichen Chip-Metallisierungssystemen.

Die absoluten Scherkraftwerte repräsentieren die Qualität der Verbindung von Bonddraht und Al-Metallisierung. Es ist erkennbar, dass die Verbindungsqualität zwischen dem Al_{0,5}Mg-Bonddraht und der AlCu- oder der AlSiCu-Metallisierung gleich gut ist. Die Bewertung der Bondausfallrate ist für den Vergleich zwischen den Metallisierungen aussagekräftiger. Hierbei sind mögliche elektrische Ausfälle aufgrund von zerstörten Dielektrika nicht berücksichtigt worden. Es werden nur fehlerhafte Bondungen berücksichtigt, die direkt im Prozess sichtbar werden. Die dabei entstehenden Fehlermodi werden nun näher betrachtet. In Abbildung 5.54 ist die relative Anzahl der Bondfehler mit Al_{0,5}Mg (Kraterbildung und Metallablösung) gezeigt. Die Werte beziehen sich dabei auf die Bondung mit den identischen Parametern auf der AlSiCu-Chipmetallisierung. Der Wert 1 auf der Ordinate besagt, dass eine gleich hohe Ausfallrate verglichen mit dem Bondprozess auf AlSiCu während des Bondprozesses eintritt. Werte < 1 zeigen eine geringere und Werte > 1 eine höhere Ausfallrate an.

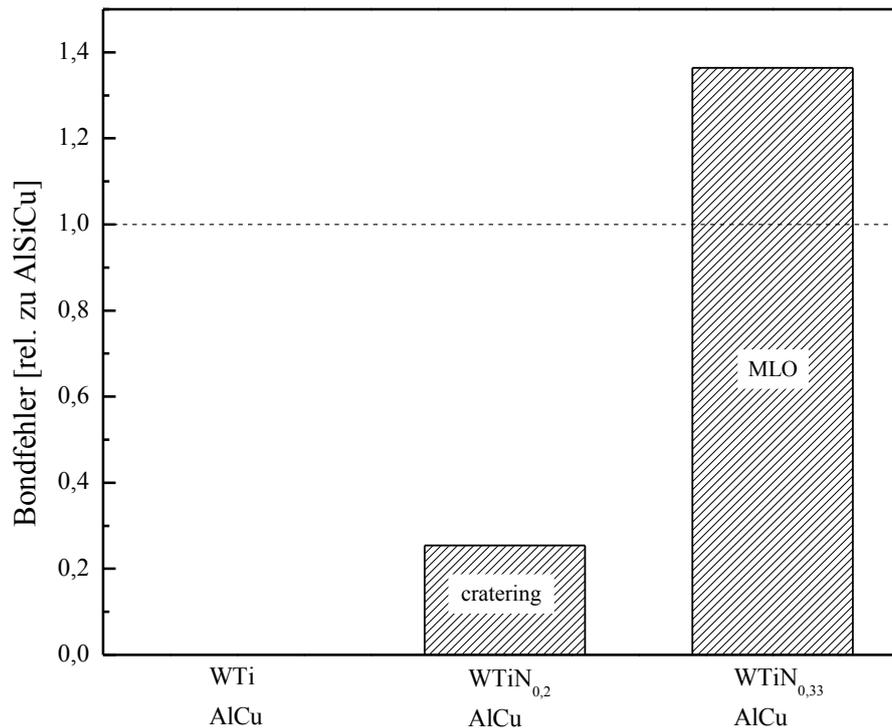


Abbildung 5.54: Relative Anzahl der Bondfehler mit AlMg0,5-Draht aufgrund von Kraterbildung oder Metallablösung auf unterschiedlichen Chipmetallisierungen.

Die nicht nitridierte WTi-Barriere in Verbindung mit AlCu als Metallisierung zeigt keine Ausfälle. Die WTiN-Barriere mit geringem Zusatz ist auf ähnlich gutem Niveau und zeigt absolut gesehen einen Ausfall (0,25%) in Folge einer Kraterbildung (*cratering*). Die WTi-Barriere mit dem höheren Stickstoffanteil und AlCu als Metallisierung besitzt eine höhere Ausfallrate als die Bondung auf AlSiCu ohne Diffusionsbarriere. Alle Fehler (1,36%) sind in Folge von Metallablösungen (MLO = *metal lift off*) aufgetreten. Dieser Fehlermodus ist auf eine verminderte Haftung der Barrierenschicht zurückzuführen. Eine Mikroskopanalyse dieses Fehlers ist in Abbildung 5.55 gezeigt. Es ist erkennbar, dass an der Stelle unter dem Bonddraht eine Delamination des Metalls an einer Grenzfläche stattgefunden hat. In Abbildung 5.55.a ist die Delamination hauptsächlich am grün erscheinenden CVD-Siliziumoxid zu erkennen. Die Schwachstelle bestand also in diesem Fall an der Grenzfläche zwischen WTiN und Si_xO_y . In Abbildung 5.55.b kann man aufgrund der Farbgebung darauf schließen, dass die Delamination an der Grenzfläche zwischen WTiN und AlCu gestartet hat. Es sind aber auch Delaminationen an der Grenzfläche zum Si_xO_y zu erkennen. Diese Ausfallbilder bestätigen, dass mit zunehmendem Stickstoffanteil in der Barrierenschicht die Haftung verschlechtert wird. Einen guten Mittelweg aus langzeitstabiler Barriere und sehr guter Bondrobustheit zeigt die WTiN-Barriere mit dem partiellen Stickstoffanteil von 0,2 während des

Sputterprozesses. Die Bondausbeute dieser Variante ist im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung deutlich verbessert und die Langzeitstabilität gegenüber Diffusion ist deutlich höher als bei WTi ohne Stickstoffanteil.

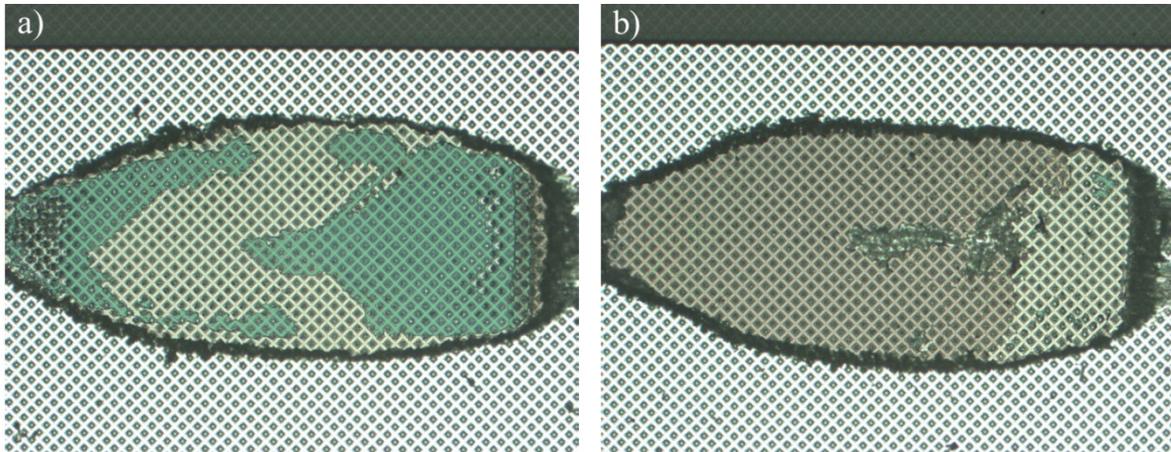


Abbildung 5.55: Optische Mikroskopaufnahme von Metallablösungen auf IGBT-Barrierenchips mit $WTiN_{0,33}/AlCu$ -Metallisierungen nach Bonden mit $Al_{10,5}Mg$ -Draht.

Der Ausfallmodus der $Al_{10,5}Mg$ -Bondung auf AlSiCu ist auf eine andere Ursache als die Haftung zum Siliziumoxid zurückzuführen. Die Ausfälle, die beim Bonden auftreten, sind hauptsächlich Kraterbildungen. In Abbildung 5.56 ist dieser Ausfallmodus gezeigt. In Abbildung 5.56.a ist erkennbar, dass die Haftung von Metall zu Bonddraht keine Schwachstelle ist, da der Krater inklusive dem AlSiCu am Bonddraht stehen bleibt. In Abbildung 5.56.b ist der Ausbruch vergrößert dargestellt. Es ist keine spezielle Grenzschicht zu erkennen an der das Metall oder die Barrierenschicht delaminiert. Der Fehlermodus *cratering* beschreibt eine Beschädigung des Metalls und den darunterliegenden Schichten infolge des Bondprozesses. Diese Beschädigung tritt in Form von Mikrorissen im Metall und im Silizium auf und führt zu Ausbrüchen, die auf keine bestimmte Grenzschicht zurückzuführen sind [85]. Diese Anfälligkeit auf mechanische Beschädigung ist eine Folge der Si-Ausscheidungen. Zum einen wird dies dadurch bestätigt, dass der Fehlerfall nur auf der AlSiCu-Metallisierung vermehrt auftritt. Zum anderen zeigten Forschungen von Onuki et al. eine höhere Affinität zu mechanischen Beschädigungen bei Verwendung einer Si-gesättigten Metallisierung und kleinen Al-Körnern [14] [15]. Die AlSiCu-Metallisierung besitzt in diesem Fall, verglichen mit der AlCu-Metallisierung, auch deutlich kleinere Körner infolge des deutlich kälteren Sputterprozesses. Die mechanisch härteren Si-Ausscheidungen sind an den Korngrenzen angeordnet und können Al-Körner und darunterliegende Schichten beim Bonden beschädigen und Rissbildung verursachen.

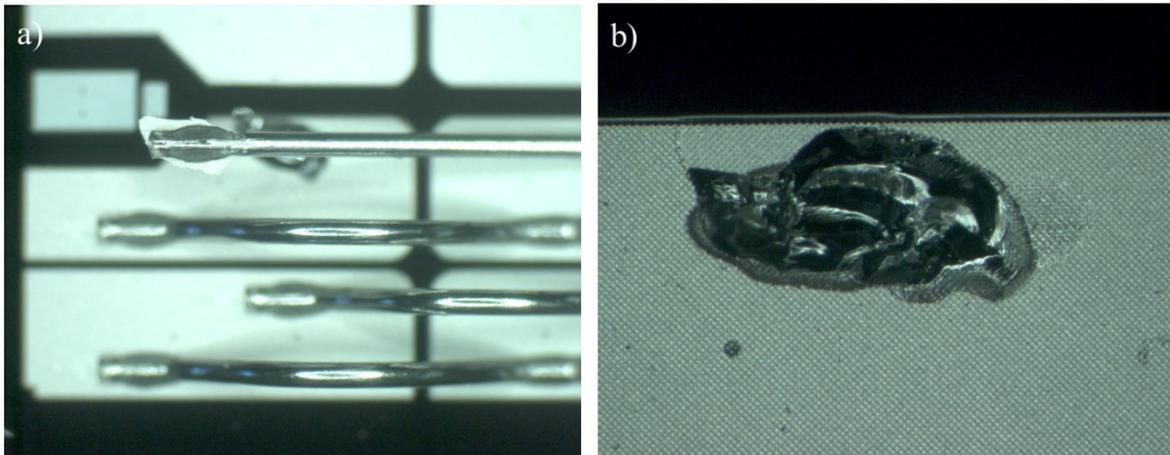


Abbildung 5.56: Kraterbildung durch Bonden von Al_{0,5}Mg auf einer AlSiCu-Metallisierung.

Dies ist eine weitere Bestätigung, dass die Bondung auf AlSiCu aufgrund der Si-Ausscheidungen als kritisch einzustufen ist, da Mikrorisse und zerstörte dielektrische Schichten die Folge sein können. Daher ist davon auszugehen, dass sich die relativen Werte der Bondfehler für die nitridierten WTi-Barrieren weiter reduzieren, wenn die elektrischen Ausfälle nach dem Bondprozess mit berücksichtigt werden. Wie zuvor bereits und von *Onuki et al.* beschrieben, können die Si-Ausscheidungen in der AlSiCu-Metallisierung während des Bondprozesses dielektrische Schichten zerstören [14]. Die kumulierte Ausfallrate aus Bondfehlern (Krater und Metallablösung) und bondinduzierten, elektrischen Fehlern, würde sich für den Fall des AlSiCu erhöhen. Die AlCu-Metallisierung mit Barriere müsste unter diesen Voraussetzungen im Vergleich weitaus positiver einzuordnen sein.

5.6.6 Interpretation der Ergebnisse

Die hergestellten Demonstratoren mit WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren zeigen die Integration in den Gesamtprozess eines Leistungshalbleiters. Die Abscheidung der Barrierenschicht ist aufgrund des Rücksputtereffekts sehr gleichmäßig, sodass die messbaren Schichtdickenschwankungen an Topografien keine potentiellen Schwachstellen in der Diffusionsbarriere darstellen. Die gemeinsame Strukturierung der Barrierenschicht mit dem Metall ist zu bevorzugen, sodass keine Oxidation an der Grenzfläche stattfinden und elektrische Übergangswiderstände entstehen können. WTi besitzt im Vergleich zu einer standardmäßig angewendeten AlSiCu-Metallisierung einen höheren Kontaktwiderstand auf p-dotierten Si-Kontakten und einen niedrigeren Kontaktwiderstand auf n-dotierten Si-Kontakten. Dies ist eine Folge aus dem Mangel von p-dotierenden Al an dem Kontakten. Der verbesserte Kontakt auf n-dotierten Si wirkt sich positiv auf die statisch-elektrischen Parameter eines IGBTs aus. Die Durchlassverluste sinken messbar. Bei der Anodenkontaktierung einer Leistungsdiode kann jedoch der verschlechterte

Kontakt auf p-dotierten Si erhöhte Durchlassverluste erzeugen. Durch den Einsatz eines geeigneten Silizids wie z.B. Pt_xSi_y kann dieser Nachteil egalisiert werden. Die Bondbarkeit konnte auf allen Demonstratoren nachgewiesen werden. Bei den Bondbarkeitstests mit hartem $\text{AlMg}_{0,5}$ -Draht zeigen die WTi - und $\text{WTiN}_{0,2}$ -Diffusionsbarriere eine verbesserte Ausbeute gegenüber der AlSiCu -Metallisierung. Dieser Vorteil ist vor allem auf die deutlich robustere Si-freie AlCu -Metallisierung zurückzuführen. Die Anwendung der stickstoffreichsten $\text{WTi}_{0,33}$ -Diffusionsbarriere ist bezüglich der Barrierenwirkung zu bevorzugen, zeigt aber in der Bondbarkeit mit $\text{AlMg}_{0,5}$ -Draht eine verschlechterte Ausbeute gegenüber der AlSiCu -Metallisierung. Durch die Stickstoffanreicherung der Barriere wird auch die Adhäsion auf Siliziumoxid verschlechtert, was durch Metallablösungen beim Bonden sichtbar wird. Die abschließende Empfehlung kann aufgrund der sehr guten Barriereneigenschaften und der verbesserten Bondausbeute gegenüber AlSiCu -Metallisierungen für die $\text{WTiN}_{0,2}$ -Diffusionsbarriere in Verbindung mit einer AlCu -Metallisierung ausgesprochen werden.

5.7 Weitere Anwendungsmöglichkeiten von WTi und WTiN

Im Rahmen dieser Forschung hat sich gezeigt, dass die Anwendung einer Diffusionsbarriere weitere positive Eigenschaften besitzt. In diesem Kapitel soll eine Anwendung der daraus entstandenen Patentanmeldung mit der Nummer 13/941,829 gezeigt werden [86].

Eine indirekte Anwendung bezieht sich auf den Einsatz der Diffusionsbarriere in Kombination mit der AlCu -Metallisierung. Durch die Substitution der AlSiCu -Metallisierung mit der Diffusionsbarriere und der AlCu -Metallisierung müssen die Sputterleistungen nicht mehr reduziert werden (Kapitel 2.2.2). Mit der AlCu -Metallisierung können somit auch höhere Topografien metallisiert werden, ohne das Abschattungseffekte zu Einschnürungen und gedünnten Metallisierungen in tieferen Kontaktlöchern führen. Solche dünnere oder fehlerhafte Bereiche in der Metallisierung können die Dichtigkeit gegenüber mobilen Ionen wie Na^+ oder Cl^- nicht mehr gewährleisten. Diese Fehler können in einem Driften der Einsatzspannung (U_{Geth}) sichtbar werden [87]. Wie bereits beschrieben wurde ergeben sich an senkrechten Profilen mit Hilfe des Rückspatters sehr konforme Abscheidungen. Die Kombination aus einer AlCu -Metallisierung mit einer WTi -Diffusionsbarriere ermöglicht eine geringere Einschränkung im Chipdesign bezüglich der Topografietiefen und Aspektverhältnisse. Eine mögliche Anwendung ist in Abbildung 5.57 gezeigt. Ein Aspektverhältnis von 1:3 kann mit der

konformen WTi-Abscheidung in Kombination mit der AlCu-Abscheidung verfüllt werden. Die Dichtigkeit gegenüber mobilen Ionen ist zum einen durch die WTi-Diffusionsbarriere und zum anderen durch die im Vergleich zu AlSiCu heiß gesputterten AlCu-Metallisierung abgesichert.

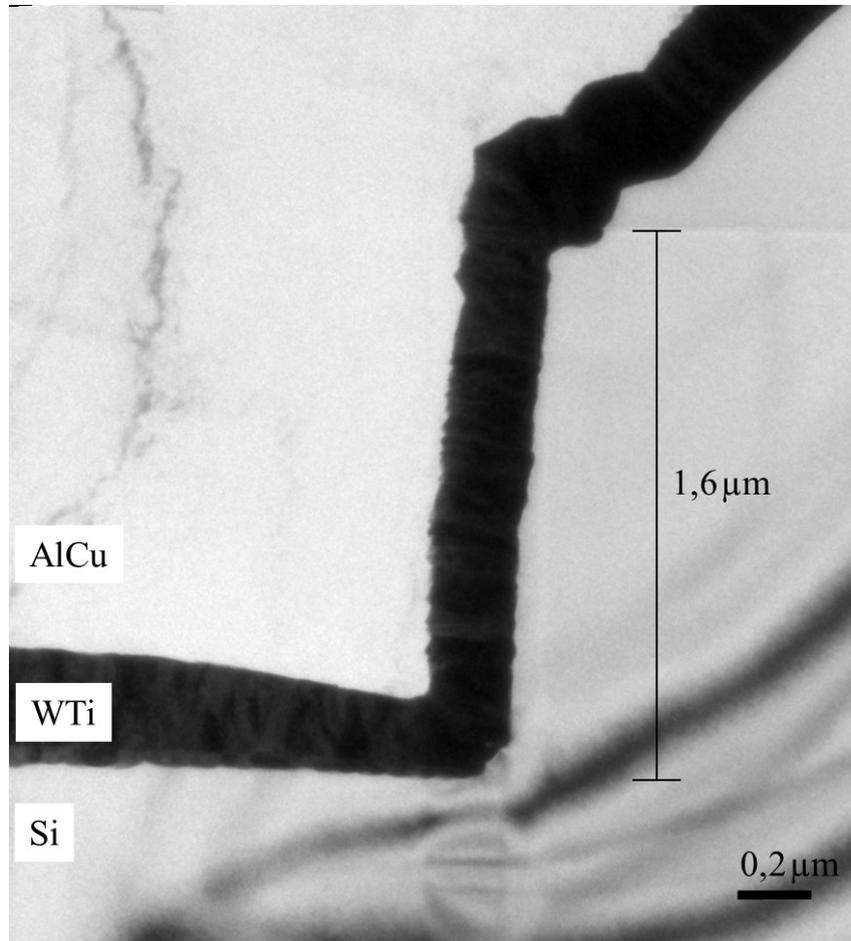


Abbildung 5.57: TEM-Aufnahme einer WTi-Diffusionsbarriere mit AlCu-Metallisierung in einem besonders tiefen Kontaktloch mit 1,6 µm Tiefe.

5.8 Diskussion der Ergebnisse

Experimentelle Durchführung

Die verwendeten Gruppen der Testwafer eigneten sich sehr gut für die durchgeführten Untersuchungen der Barrierendünnschichten. Die Barrierentestscheiben und die analog hergestellten Charakterisierungsscheiben waren einfach herzustellen und vielfach einsetzbar. Alle analytischen Messungen konnten an dieser Gruppe durchgeführt werden. Für die einzelnen Testverfahren konnte die Schichtdicke der Barriere und der Metallisierung angepasst werden. Dabei variierte die Barrierendicke zwischen 50 und

100 nm während die AlCu-Metallisierungsdicke bei 1000 nm konstant gehalten wurde. Die einzige Ausnahme bildeten dabei die Charakterisierungsscheiben, die nur aus einer 100 nm dicken Barriere ohne Metallisierung bestanden. Die Integration von erfolgsversprechenden Barriersystemen erfolgte auf funktionsfähigen Leistungshalbleitern. Die Metallisierungsdicke betrug 3200 nm während die Barrierendicke auf 100 nm fixiert war. Lediglich der Test zur Bewertung von weiteren Anwendungsmöglichkeiten erforderte eine höhere Schichtdicke der Barriere (300 nm), da das Aspektverhältnis aus Tiefe zu Breite des zu verfüllenden Bereichs deutlich erhöht wurde.

Sputterabscheidung von WTi und WTiN

Der Rücksputtereffekt, welcher die Reaktion von gestreuten Edelgasatomen am Target beschreibt, besitzt einen immensen Einfluss auf die Dünnschichtcharakteristika von WTi und WTiN. Dies konnte sowohl experimentell, theoretisch als auch simulativ gezeigt werden. Als Parameter zur Steuerung dieses Effekts können der Sputterdruck, eine zusätzliche Bias-Leistung und das Sputtergas eingesetzt werden. Ein niedriger Sputterdruck bedeutet eine hohe Rücksputterrate von Ti aus der aufwachsenden Schicht, welches sich in einem niedrigen Ti-Gehalt widerspiegelt. Eine hohe Rücksputterrate bedeutet jedoch auch eine Reaktion mit der abzuschneidenden Schicht. In diesem Fall sind Gitterverzerrungen und Einbau von Edelgas die Folge, die einen hohen kompressiven Schichtstress und einen hohen Schichtwiderstand nach sich ziehen. Durch eine additive Bias-Leistung wird der Rücksputtereffekt verstärkt, was zu noch geringeren Ti-Gehältern, höherem Schichtstress und höheren Schichtwiderständen führt. Das Rückstreuen von Edelgas wird aufgrund der hohen Massendifferenz zwischen dem Edelgas und W hervorgerufen. Dieser Effekt ist bei Ar am größten und kann beim Verwenden von schwereren Edelgasen, wie z.B. Kr oder Xe, reduziert werden. Beim Verwenden dieser Sputtergase ist eine Erhöhung des Ti-Gehalts und eine Stressreduzierung, bis hin zu tensilem Schichtstress, zu beobachten. Die verminderte Reaktion ist zudem an der Abscheidetemperatur zu erkennen, welche sich bei schwereren Edelgasen deutlich reduziert. Eine weitere Möglichkeit die Abscheidung von WTi zu verändern ist der Einsatz des reaktiven Sputterprozesses. Als reaktive Komponente dient z.B. N₂. Durch die Verwendung von N₂ erhöhen sich die Parameter Schichtstress, Schichtwiderstand und Ti-Gehalt deutlich. Während der Abscheidung bildet sich ein Mischkristall aus WN und TiN aus. Es hat sich gezeigt, dass die Bildung von TiN einen Vorteil bezüglich der Langzeitstabilität gegenüber Diffusion bringt.

Langzeitverhalten von WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren

Mit Hilfe der Variationen des Sputterprozesses konnte gezeigt werden, dass der Ti-Gehalt einen entscheidenden Einfluss auf die Barrierenstabilität besitzt. Je mehr Titan in der

Dünnschicht vorhanden ist, desto schlechter ist das Langzeitverhalten gegenüber Diffusion. Der Grund für dieses Verhalten ist die Diffusivität von Ti in Al.

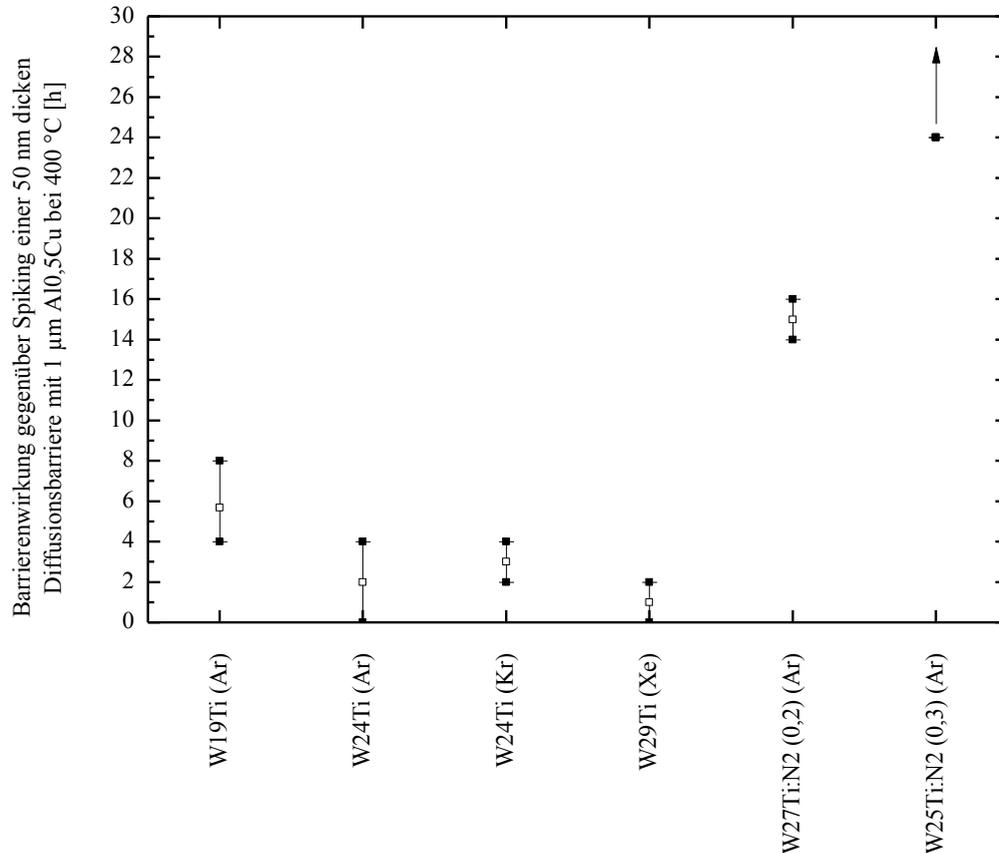


Abbildung 5.58: Vergleich unterschiedlicher WTi-Barrieren bezüglich ihrer Barrierenwirkung gegenüber Al/Si-Diffusion bei 400 °C Temperaturbelastung.

Es konnte eine Diffusion von Ti aus WTi in die AlCu-Metallisierung bei Temperaturen ≥ 350 °C nachgewiesen werden. Diese Temperaturen können sowohl bei den auf die Barrierenabscheidung folgenden Prozessschritten als auch in der Anwendung während nicht zerstörenden Kurzschlußsituationen auftreten. Um die Alterung schon in der Herstellung auszuschließen und eine gute Langzeitstabilität zu gewährleisten, muss die Ti-Diffusion und die damit verbundene Schwächung der Barrierenschicht verhindert werden. Dies kann entweder mit Hilfe eines sehr geringen Ti-Gehalts oder eines reaktiven Sputterprozesses mit N_2 erfolgen. Bei Verwendung des reaktiven Sputterprozesses mit N_2 bildet sich TiN, welches keine Tendenz zur Diffusion in das Al zeigt. Die favorisierten Barrieren sind daher die WTi-Barriere mit einem sehr geringen Ti-Gehalt und die WTiN-Barrieren. Die getesteten WTi-Dünnschichten in Kombination mit AlCu als Metallisierungen sind bezüglich ihrer Barrierenwirkung in Abbildung 5.58 zusammengefasst dargestellt. Die Bewertung wurde anhand des beschriebenen HTS-Barrierentests bei 400 °C vorgenommen.

Integration in Leistungshalbleiter

Es konnte die Integration einer Diffusionsbarriere in ein Leistungshalbleiterbauelement gezeigt werden. Die Abscheidung der Barrierendünnschicht ist aufgrund des Rücksputtereffekts überaus konform und scheidet sich sogar an vertikalen Strukturen gleichmäßig ab. Diese Dünnschicht besitzt aufgrund der gleichmäßigen Abscheidung eine Dichtigkeit gegenüber mobiler Ionen, wie z.B. Na^+ . Die Strukturierung lässt sich in die Arten „in situ“ und „ex situ“ Ätzung unterteilen. Während bei der in situ Ätzung die Barriere und die Metallisierung in einem Prozessschritt abgeschieden und anschließend strukturiert werden, geschieht dies bei der ex situ Ätzung in getrennten Prozessen. Sowohl die Barrierendünnschicht als auch die Metallisierung werden dabei einzeln strukturiert. Diese Art der getrennten Strukturierung kann jedoch zu Nachteilen führen, da die Oberfläche der WTi-Barrierenschicht oxidieren kann. Diese suboptimale Art der Prozessierung kann zu einer stark oxidierten Grenzflächen und daraus folgenden erhöhten Widerstandswerten, Spannungsabfällen und Haftungsproblemen führen. Beide Arten der Strukturierung führen zu sehr guten Ätzbildern ohne Unterätzungen.

Die Integration einer Diffusionsbarriere führt zu einer Veränderung des elektrischen Verhaltens eines Leistungshalbleiters. Der Metall-Halbleiter-Kontakt wird über WTi/WTiN hergestellt. Die Kontaktwiderstände zeigen auf p^+ -Kontakten eine Erhöhung und auf n^+ -Kontakten eine Senkung im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung. Damit verbunden ist je nach WTi-Variante auch eine Veränderung von statischen Parametern wie z.B. des Durchlassverlusts (U_{CE}) oder der Einsatzspannung (U_{GEth}). Diese Veränderungen sind jedoch sehr gering und können über minimale Veränderungen im Halbleiter angepasst werden. Eine deutliche Verbesserung durch den Einsatz einer Diffusionsbarriere ist jedoch in der Bondausbeute zu erkennen. Während im Bondprozess mit einem Al-Draht keine Unterschiede zur AlSiCu-Metallisierung zu erkennen waren, ist die Veränderung bei Verwendung eines härteren Al_{0,5}Mg-Bonddrahts deutlich. Die Scherkräfte sind zwar vergleichbar, jedoch ist eine erhebliche Verbesserung in der Bondausbeute mit WTi-Barriere und AlCu-Metallisierung zu erkennen. Es ist ebenfalls zu beobachten, dass die diffusionsstabilste Barriere (WTiN_{0,33}) eine ähnlich schlechte Ausbeute wie AlSiCu besitzt. Mit Hilfe einer stärkeren Bonddrahtverformung und der Verwendung von härteren Drähten kann die Forderung nach höherer Lastwechselfähigkeit erfüllt werden. Aus diesem Grund ist die Diffusionsbarriere anzuwenden, die neben der Langzeitstabilität auch eine ausreichende Bondrobustheit besitzt.

Die WTi-Diffusionsbarriere kann zudem für die Integration auf Halbleitern mit hohen Topografieaspektverhältnissen verwendet werden. Mit Hilfe der konformen Abscheidung von WTi und der Verwendung einer AlCu-Metallisierung, die ohne Leistungsreduzierung abgeschieden werden kann, können auch vertiefte Gräben auf Leistungshalbleitern verfüllt

werden. Eine Dichtigkeit gegenüber mobiler Ionen wie z.B. Na^+ ist mit Hilfe dieser Veränderung nicht mehr in Frage zu stellen.

Zielvariante der Diffusionsbarriere

Als Zielvariante der WTi-Diffusionsbarriere zählt zum einen die WTi-Barriere mit einem geringen Ti-Anteil. Die Herstellung erfolgte mit einer additiven Bias-Leistung. Da in dieser Barriere jedoch das Ti ausdiffundiert und dies somit die Barriere schwächt, muss die Dicke der Schicht mindestens 300 nm betragen. Diese Dicke kann mit Hilfe des reaktiven Sputterprozesses herabgesetzt werden. Die stickstoffreichste Barriere ($\text{WTiN}_{0,33}$) ist jedoch nicht ausnahmslos bondrobust, wodurch sich nur der Einsatz der stickstoffärmeren Barriere ($\text{WTiN}_{0,2}$) empfiehlt.

Als Alternative kann ein kombinierter Prozess aus WTi und WTiN erfolgen. Der reaktive Prozess wird erst nach circa 50 nm Abscheidung gestartet, wodurch sich einerseits die Haftung auf den Siliziumoxid verbessert und andererseits die Grenzfläche zum AlCu durch die Nitridierung gestärkt wird.

6 Zusammenfassung

Leistungshalbleiter gehören aufgrund des Einsatzgebietes und der damit verbundenen geforderten Lebensdauer von über 20 Jahren zu einer Ausnahmeerscheinung in der Halbleiterfertigung. Sowohl der komplexe Fertigungsprozess auf Chipebene als auch die thermische und mechanische Stabilität im Endprodukt „Modul“ stellt eine fortwährende Herausforderung dar. Zusätzlich ergeben sich im Zuge der Wirkungsgradoptimierung im Bereich der Bahntechnik neue Kundenanforderungen, die ein Leistungshalbleiter möglichst ohne Kostenerhöhung leisten muss. Zur Erfüllung dieser Forderung muss in der Chip- und Modulherstellung ein Gleichgewicht aus hohem Durchsatz, geringem Ausschuss, hoher Qualität und geringen Kosten gefunden werden. Mit anderen Worten: Der Herstellungsprozess bis zum fertigen Modul muss effizient sein. Die Metallisierungssysteme, welche die Schnittstelle zwischen Halbleiter und Modul darstellen, besitzen dabei einen hohen Stellenwert. In der Chipfertigung kann die Metallisierungsabscheidung inklusive Strukturierung einen der teureren Prozesse darstellen. Die Qualität der Chipmetallisierung spiegelt sich in der Ausbeute während der Modulherstellung wider. Aufgrund der gestiegenen Forderungen zu höherer Temperaturzyklenfestigkeit ist ein Trend zu härteren Parametern im Bondprozess und ein Wechsel zu härteren Drähten wie AlMg oder Cu abzusehen.

Das bisher angewendete Metallisierungssystem AlSiCu ist diesen Anforderungen technologisch nur bedingt gewachsen. Der kombinierte Einsatz einer Diffusionsbarriere mit AlCu als Chipmetallisierung bietet die Möglichkeit diese Herausforderung auf Chipebene zu lösen. Neben der Verwendung von neuen Bondprozessen kann der Einsatz einer Barrierendünnschicht eine höhere Effizienz sowohl in der Chipherstellung als auch im Modulverbau erzielen. Es muss jedoch sichergestellt werden, dass die Langzeitstabilität gegenüber Al/Si-Diffusion gewährleistet ist.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden hauptsächlich WTi, WTiN, und Ta/TaN-Diffusionsbarrieren untersucht. Eine diffusionsstabile Dünnschicht zur Anwendung in Leistungshalbleitern muss neben der Barrierenwirkung zudem gute elektrische und mechanische Eigenschaften aufweisen. Aufgrund dieser Tatsache wurde neben der Langzeitstabilität gegenüber Diffusion auch die Integration in einem Leistungshalbleiter untersucht. Zu der Integration zählen die Sputterabscheidung, die Strukturierung, die elektrische Performance und die Bondrobustheit.

Die Werkstoffkombination aus W und Ti erfüllt unter bestimmten Voraussetzungen diese Forderungen. Die charakteristischen Eigenschaften wie z.B. der spezifische Widerstand, der mechanischer Schichtstress oder die Schichtzusammensetzung werden der Dünnschicht

während des Sputterprozesses mitgegeben. Diese Eigenschaften wirken sich wiederum auf die Diffusionsstabilität und die Integration auf einem Leistungshalbleiter aus. Die Anforderungen an die Barrierendünnschicht kann nur durch einen stabilen und gut verstandenen Prozess geleistet werden.

In dieser Ausarbeitung wurde erstmals den Sputterprozess von WTi und WTiN vollständig evaluiert. Auf dieser Grundlage konnte der Einfluss der Prozessvariationen auf die Barrierenwirkung dargestellt werden. Das Detektieren des Fehlermechanismus von WTi mit AlCu als Metallisierung ist für das Grundlagenverständnis ein notwendiger Schritt und konnte trotz jahrelangen Bekanntheitsgrades dieser Werkstoffverbindung erstmals gezeigt werden. Die darauf basierende Entwicklung zum Entgegenwirken des Fehlermechanismus konnte eine deutliche Erhöhung der Langzeitstabilität erzielen. Während der Integration in einen Leistungshalbleiter konnten technologische Herausforderungen gelöst und die potentielle Realisierbarkeit gezeigt werden.

Diese Arbeit zeigt allerdings auch, dass die Integration einer Diffusionsbarriere einer detaillierten Untersuchung bedurfte. Auf der einen Seite wird deutlich, dass jegliche Interaktion der beteiligten Werkstoffe geprüft werden muss. Im Fall des WTi erscheint es fast paradox, dass der Ausfallmechanismus der Diffusionsbarriere die Diffusion einer ihrer Bestandteile selbst ist. Außerdem konnte in einer additiven Veröffentlichung gezeigt werden, dass die WTi-Dünnschicht bei einem Wechsel zu Cu als Metallisierung deutlich langzeitstabiler ist, als mit einer Al-Metallisierung [74]. Auf der anderen Seite muss neben der reinen Diffusionsbarrierenwirkung auch die Integration in einen Leistungshalbleiter untersucht werden. Es zeigte sich zum Beispiel für die WTiN-Barriere, dass diese besonders diffusionsstabile Barriere elektrische und mechanische Nachteile besitzt. Auch in diesem Punkt wird deutlich, dass ein Gleichgewicht aus Diffusionsstabilität, Integration und Effizienz gefunden werden muss.

Die Empfehlung wird an den in situ Abscheide- und Strukturierungsprozess gegeben, da er bezüglich der Reproduzierbarkeit und des elektrischen Verhaltens ein Optimum darstellt. Der abschließende Test zur Beurteilung der Bondrobustheit auf Leistungshalbleitern zeigt, dass mit einer stickstoffreduzierten Variante des WTiN ein Maximum aus Barrierenstabilität und Integration erzielt werden kann.

Als Alternative zu WTi und WTiN wurden Ta und TaN als Barrierenwerkstoff untersucht. In Anbetracht der Diffusionsstabilität und des elektrischen Verhaltens ist Ta für eine Anwendung auf Leistungshalbleitern geeignet und bietet Potential für weiterführende Untersuchungen.

7 Ausblick

7.1 Ta und TaN als Diffusionsbarriere

Die Ausarbeitungen in Kapitel 4.3 zeigen, dass auch Tantal (Ta) als Werkstoff für Dünnschichtdiffusionsbarrieren in Frage kommt. Im Folgenden werden analog zu den WTi-Versuchen die mechanischen und elektrischen Eigenschaften von Ta untersucht. Darauf aufbauend wird die Diffusionsstabilität mit den vertrauten Verfahren bewertet und für die erfolgsversprechenden Varianten die Integration auf einem Leistungshalbleiter gezeigt.

In den Experimenten mit der WTi-Dünnschicht hat sich herausgestellt, dass geringe Drücke bei der Sputterabscheidung zu mikrostrukturellen Vorteilen führen. Daher wurden auch bei der Abscheidung von Ta und TaN niedrige Sputterdrücke (ca. 1×10^{-3} mbar) verwendet, um ein kolumnares Schichtwachstum zu verhindern. Als Sputtergas wurde Ar benutzt. Aufgrund der hohen Differenz der relativen Atommasse von Ta (180,9 u) im Vergleich zu Ar (39,9 u) ist, ähnlich wie bei den WTi-Experimenten, mit einem hohen Rückstreuen von Ar zu rechnen. In der Tabelle 7.1 sind die Prozessparameter der getesteten Ta- und TaN-Barrieren zusammengefasst.

Tabelle 7.1: Ausgewählte Prozessparameter der getesteten Ta- und TaN-Barrierendünnschichten

		Sputtergas	Partialfluss N₂	Sputterdruck	Bias-Leistung
1.	Ta	Ar	0	$0,6 \times 10^{-3}$ mbar	0 W
2.	TaN	Ar	0,2	$1,1 \times 10^{-3}$ mbar	0 W

Der Schichtstress und der Schichtwiderstand der getesteten Ta- und TaN-Dünnschichten sind in Abbildung 7.1 dargestellt. Die Werte der bereits beschriebenen WTi- und WTiN-Barrieren sind zum Vergleich mit aufgelistet. Anhand der Daten des Schichtstress in Abbildung 7.1.a ist erkennbar, dass auch Ta- und TaN-Dünnschichten einen kompressiven Schichtstress besitzen. Das ist für den Fall der Ta-Schicht auf das rückgestreute Ar und die Reaktion mit der aufwachsenden Schicht zurückzuführen. Analog zu WTiN zeigt auch TaN eine deutliche Erhöhung des Schichtstress im Vergleich zu der stickstofffreien Schicht, was auf den Einbau von N₂ in die Schicht zurückzuführen ist. Bei Betrachtung des Schichtwiderstandes in Abbildung 7.1.b fällt auf, dass Ta einen 2,5-fach höheren Wert besitzt als WTi. Der Vergleich von TaN und WTiN (gleicher Partialfluss) zeigt ein ähnliches Verhalten. Hierbei ist der Schichtstress und der Schichtwiderstand um circa den Faktor 2 höher. Dieses Ergebnis bestätigt auch, dass Ta in der Mikroelektronik als

Dünnschichtwiderstand eingesetzt wird [88]. Für die Integration in einem Leistungshalbleiter kann dies vor allem für den Kontakt auf p-dotierten Bereichen zu Problemen führen.

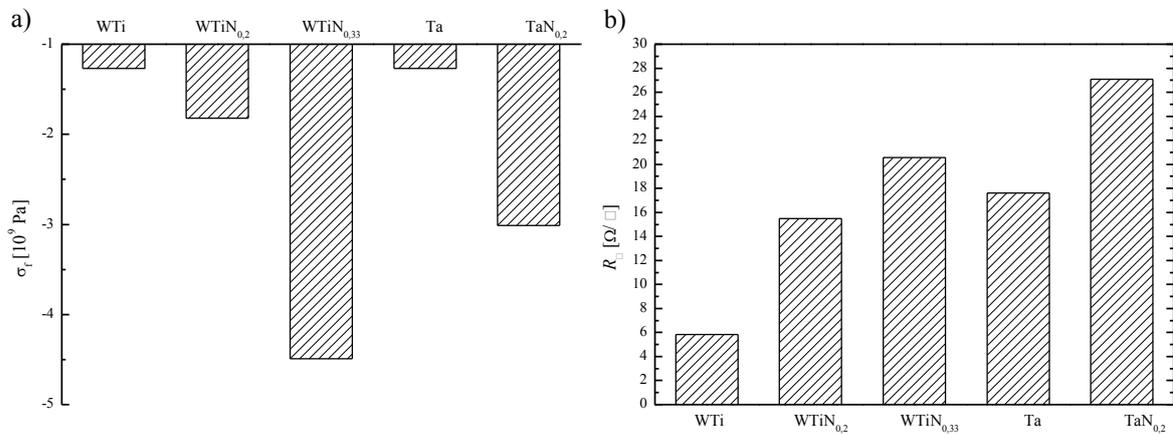


Abbildung 7.1: Vergleich des a) Schichtstresses σ_f und b) Schichtwiderstands R_{\square} von Ta und TaN mit den evaluierten WTi-Dünnschichten.

Die Tests zur vorläufigen Bewertung der Diffusionsstabilität wurden mit Hilfe der bekannten Testverfahren aus Kapitel 5 durchgeführt. Hierzu wurde analog dem Prozess aus der Abbildung 5.4 auf den Barrierentestscheiben eine 50 nm dicke Ta- und TaN-Dünnschicht und eine 1 μ m dicke AlCu-Metallisierung abgeschieden. Ein HTS-Test bei 400 °C für bis zu 24 h stellte die beschleunigte Alterung dar. Da die Dünnschichten Ta und TaN nicht nasschemisch ätzbar sind, musste die Betrachtung des Si-Substrats zur Bewertung der Diffusionsstabilität jeweils im Schlifffbild erfolgen. Die Ergebnisse dieser Experimente sind in Abbildung 7.2 dargestellt und werden mit den Ergebnissen aus Abbildung 5.58 verglichen. Es ist deutlich erkennbar, dass Ta und TaN eine Barrierenwirkung gegenüber Diffusion von Al und Si bei 400 °C bis zu einer Dauer von 24 h Temperaturbelastung besitzt. Das gleiche Ergebnis konnte bisher nur mit der WTiN-Barriere und einem N₂-Partialfluss von 0,33 erzielt werden. Das Ergebnis ist besonders für die stickstofffreie Ta-Dünnschicht überraschend und bedeutet, dass der Werkstoff Ta für die Kombination mit AlCu als Metallisierung sehr gut als Metallisierungssystem geeignet ist. Die Passivität gegenüber einer Reaktion mit der Metallisierung ist gegeben.

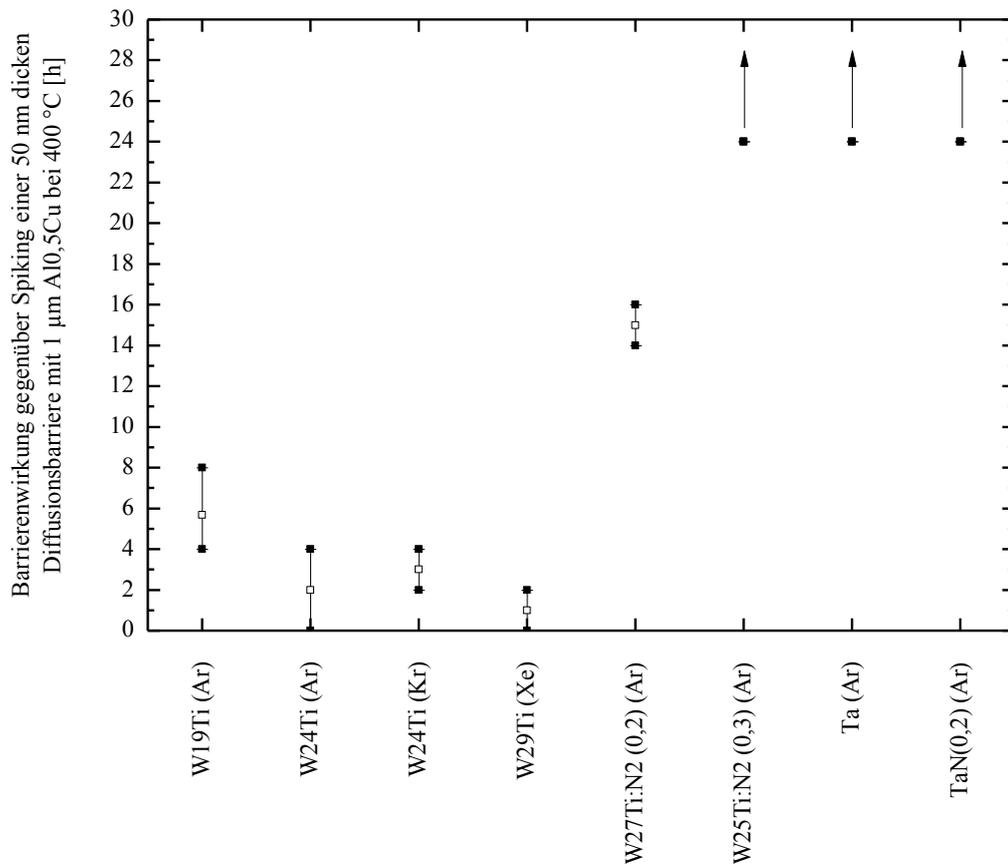


Abbildung 7.2: Barrierenwirkung von Ta und TaN gegenüber Al/Si-Diffusion bei 400 °C Temperaturbelastung verglichen mit den getesteten WTi-Barrieren.

Aufgrund der vielversprechenden Ergebnisse bezüglich der Barrierenwirkung wurde sowohl für Ta als auch für TaN eine Integration auf Chipebene überprüft. Es wurden analog zu den WTi-Integrationstests eine 100 nm dicke Ta- und TaN-Barriere mit einer 3200 nm dicken AlCu-Metallisierung kombiniert. In Abbildung 7.3 ist die Sputterabscheidung der Ta-Barriere anhand einer TEM-Analyse dargestellt. Die Barriere scheidet sich an der vertikalen Kontaktlochgeometrie homogen ab. Die Dünnung an der Seitenwand beträgt etwa 50%. Die Vergrößerungen der TEM-Analysen, deren sehr gute Auflösung durch eine zusätzliche Dünnung an der Lamelle erzielt wurde, geben einen Hinweis auf die Mikrostruktur der Dünnschicht. Neben der abgeschätzten Korngröße von circa 20 nm ist eine sehr homogene, nicht kolumnare, polykristalline Schicht zu erkennen. Dies ist eine potentielle Erklärung für die sehr gute Barrierenstabilität dieses Werkstoffs.

Im Weiteren wurde das Metallisierungssystem in situ plasmachemisch geätzt. Als reaktives Gas konnte wie bei WTi auch Cl_2 gewählt werden. Zudem gab es einen nur sehr geringen Unterschied in Ätzrate und Selektivität, sodass das Emissionsspektrum nahezu identisch mit dem aus Abbildung 5.47 ist.

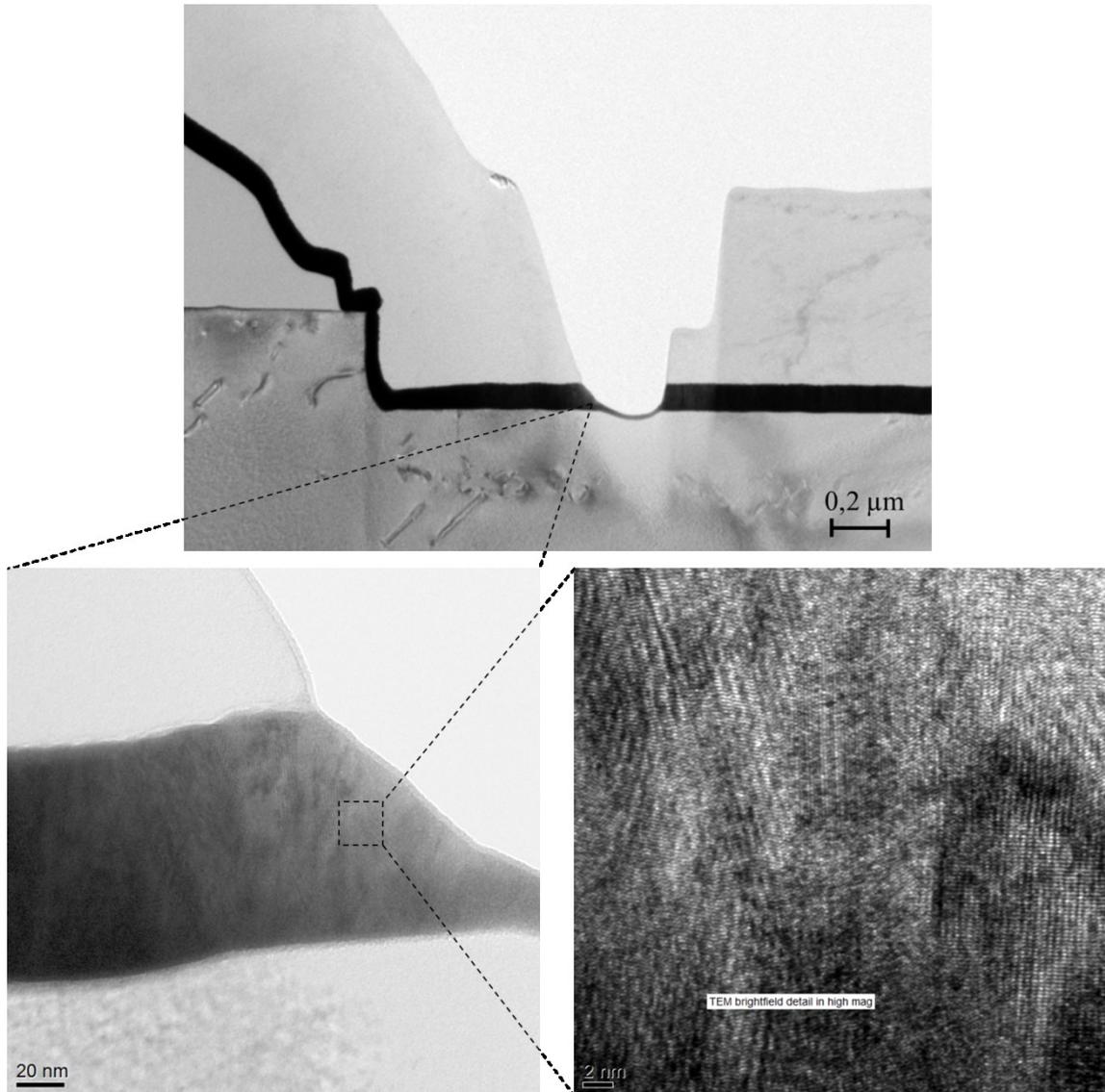


Abbildung 7.3: TEM-Analyse mittels BF-Detektor an Ta (100 nm) mit AlCu (3200 nm) als Metallisierung.

Die in Abbildung 7.4 dargestellten Kontaktwiderstände auf n^+ - und p^+ -dotierten Bereichen von Ta und TaN geben einen Hinweis auf die elektrischen Eigenschaften dieser Dünnschicht. Es ist zu erkennen, dass TaN deutlich erhöhte Kontaktwiderstandswerte sowohl auf n - als auch auf p -dotierten Bereichen zeigt. Auf p -dotierten Bereichen steigt dieser Wert bis auf das 25-fache an. Dies ist in Bezug auf die dynamische Robustheit des Chips nicht tolerierbar. Bei Betrachtung von Ta fällt auf, dass der Kontaktwiderstand auf n , wie bei WTi um circa das 4-fache im Vergleich zu AlSiCu als Kontaktwerkstoff sinkt. Die Verringerung des Kontaktwiderstands auf n ist also eine Folge vom Wegfall des gegendotierenden Al. Auch der Kontaktwiderstand auf p ist mit WTi vergleichbar und nimmt auf den doppelten Wert zu.

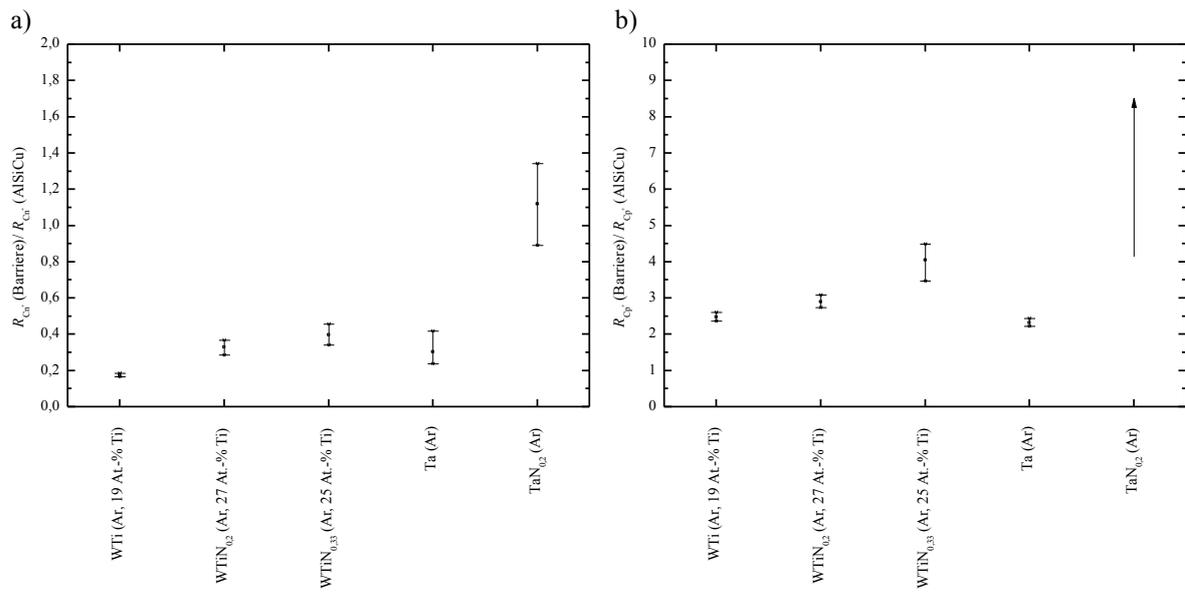


Abbildung 7.4: Relative Kontaktwiderstände auf a) n-dotierten Bereich und b) p-dotierten Bereich von WTi, WTiN_{0,2}, WTiN_{0,33}, Ta und TaN_{0,2} im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung.

Die dargestellten Ergebnisse zeigen das Potential für Ta und TaN als Diffusionsbarriere. Bezüglich der Barrierenwirkung gegenüber Al/Si-Diffusion ist dieser Werkstoff sehr gut anwendbar. Anhand der elektrischen Ergebnisse ist allerdings zu erkennen, dass nur Ta praktisch anwendbar ist. TaN ist als direktes Kontaktmaterial aufgrund des hohen Kontaktwiderstands auf p nicht geeignet.

A Anhang

A.1 Ti-Diffusionsprofile

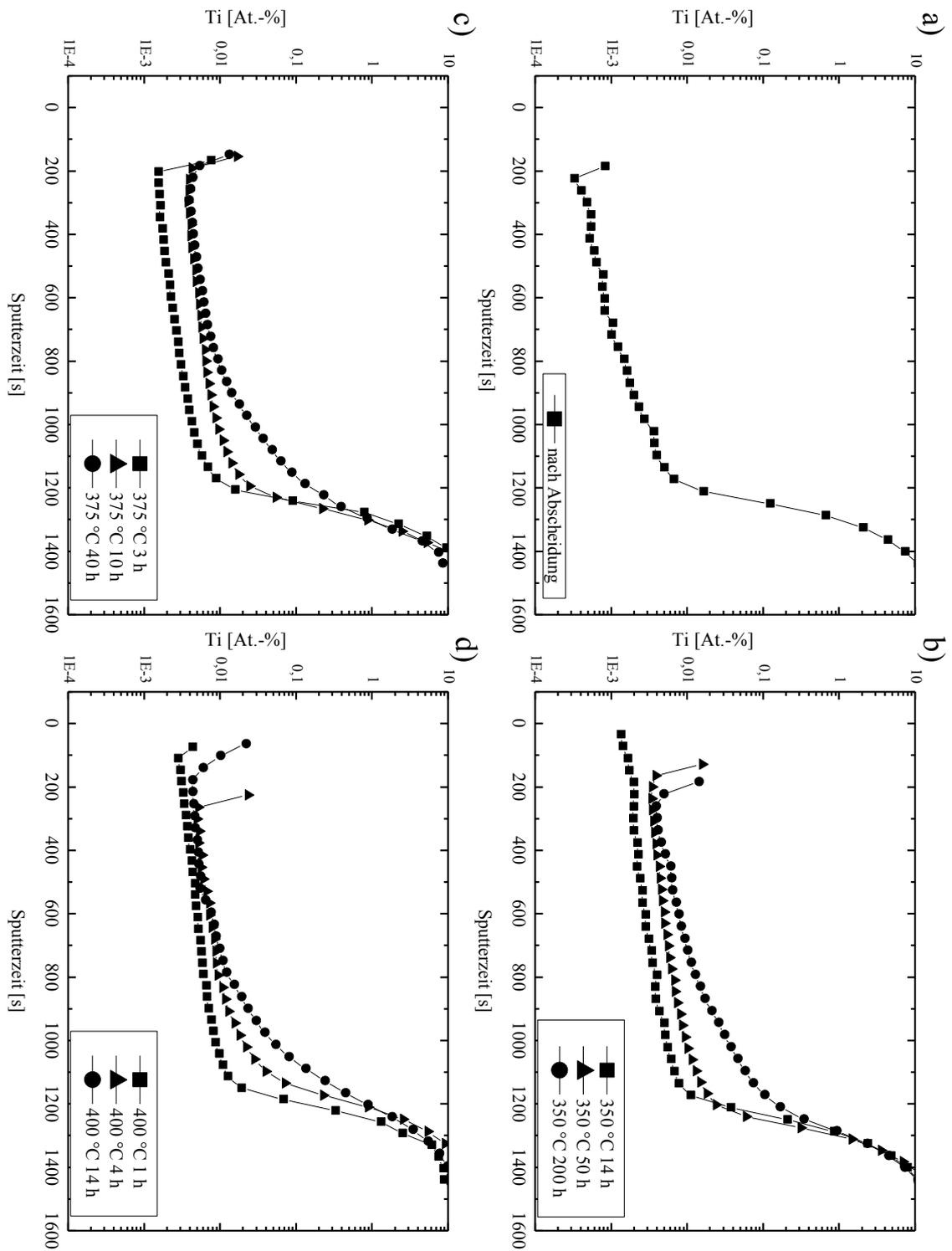


Abbildung A.1: SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu (1000 nm)/WTi (100nm) nach a) Abscheidung, b) 350 °C, c) 375 °C, d) 400 °C HTS-Test für jeweils drei Belastungszeiten.

A.2 Relative Ti-Intensität

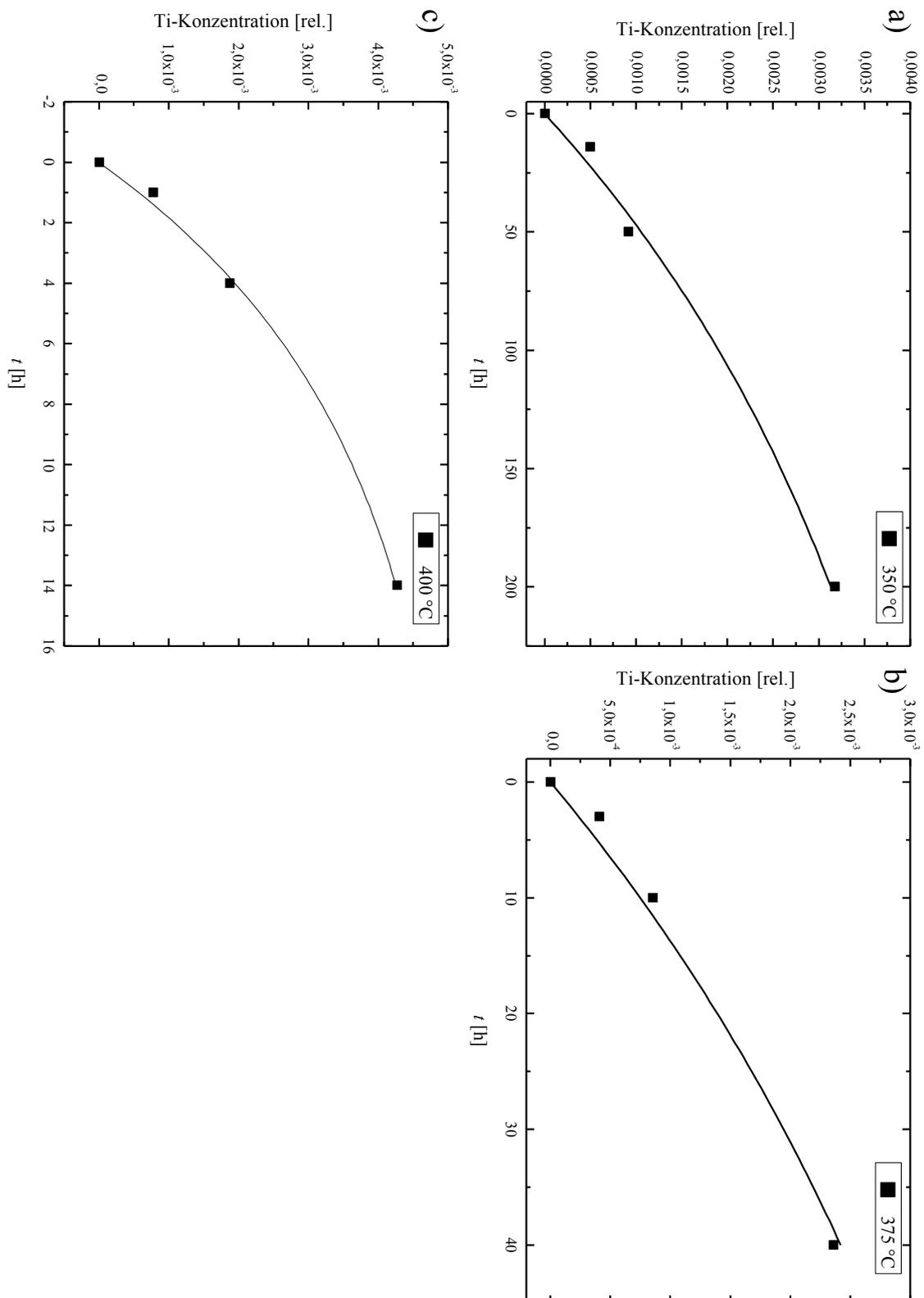


Abbildung A.2: Relative Ti-Intensität in Bereich 2 der Diffusionskurve in Abhängigkeit der Zeit im HTS-Test bei a) 350 °C, b) 375 °C und c) 400 °C.

A.3 XPS-Detailspektren

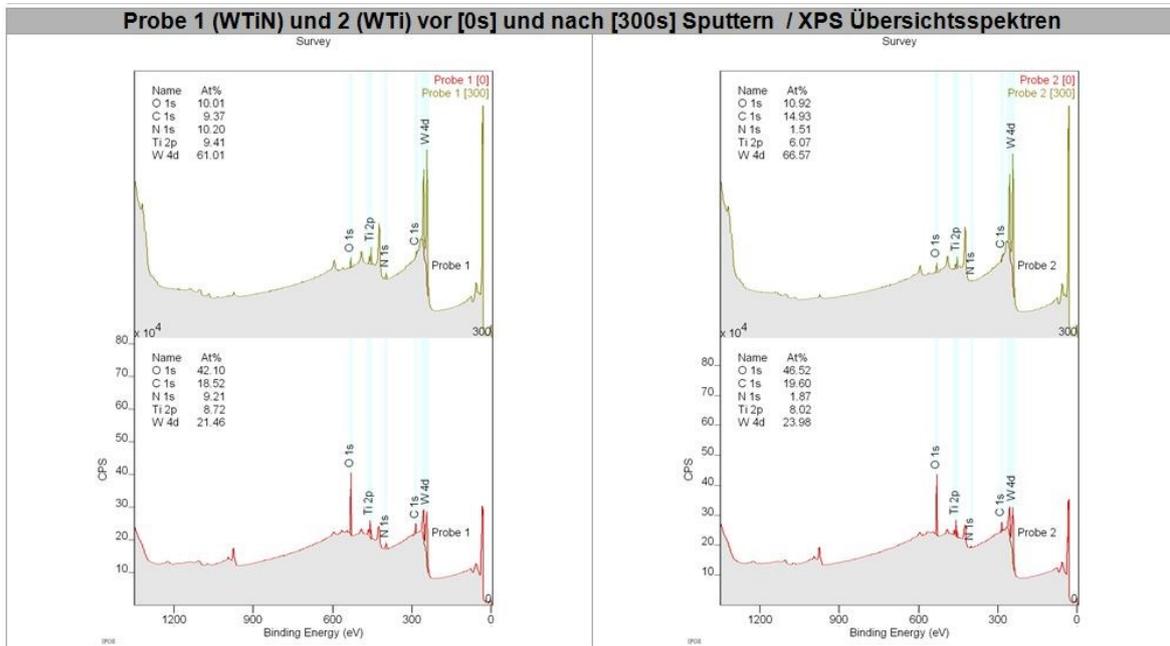
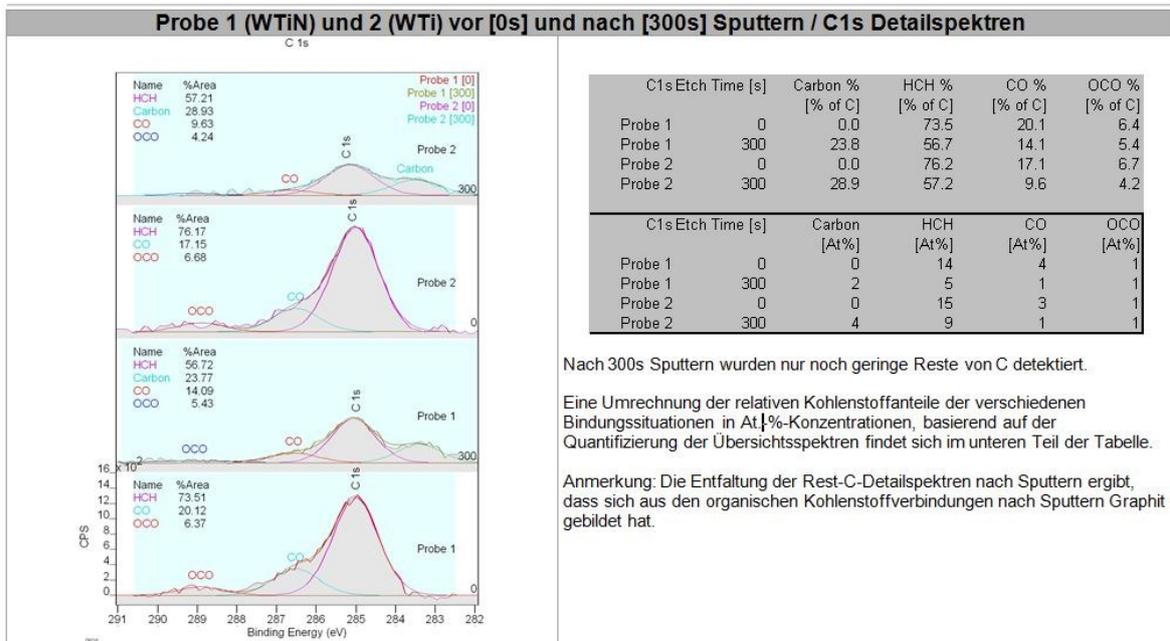


Abbildung A.3: XPS-Übersichtsspektren vor (0 s) und nach (300 s) Sputterabtrag. Konzentrationsangaben in At.-%. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.



Nach 300s Sputtern wurden nur noch geringe Reste von C detektiert.

Eine Umrechnung der relativen Kohlenstoffanteile der verschiedenen Bindungssituationen in At.-%-Konzentrationen, basierend auf der Quantifizierung der Übersichtsspektren findet sich im unteren Teil der Tabelle.

Anmerkung: Die Entfaltung der Rest-C-Detailsspektren nach Sputtern ergibt, dass sich aus den organischen Kohlenstoffverbindungen nach Sputtern Graphit gebildet hat.

Abbildung A.4: C1s-Detailsspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie des dominierenden C1s-Teilpeaks von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.

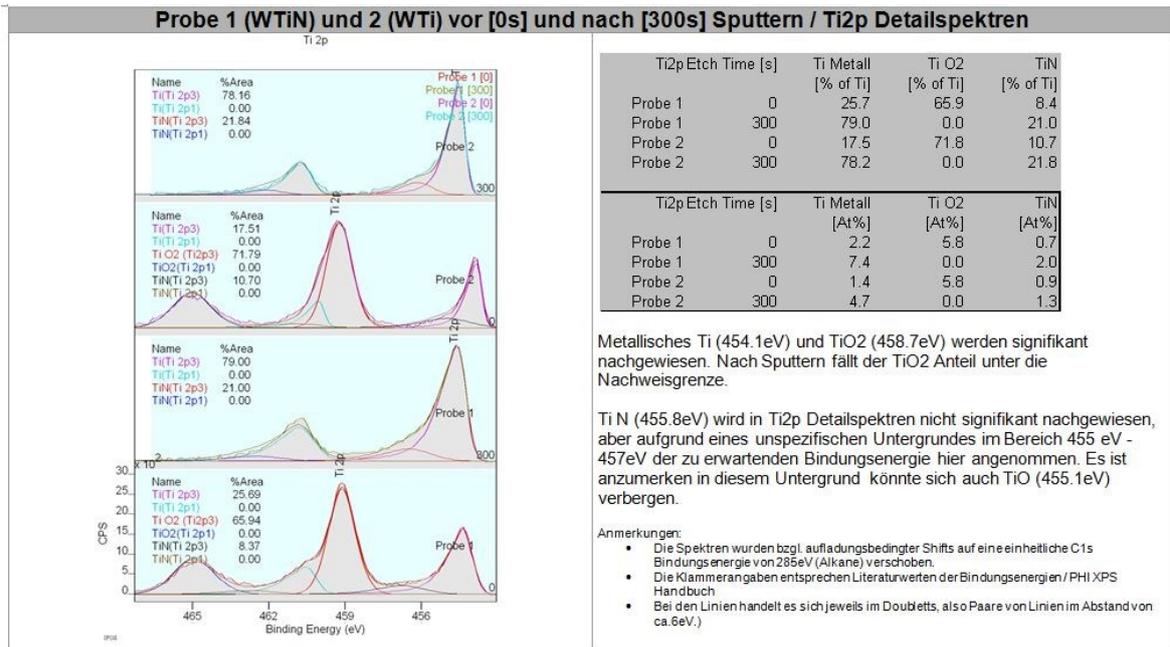


Abbildung A.5: Ti2p-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.

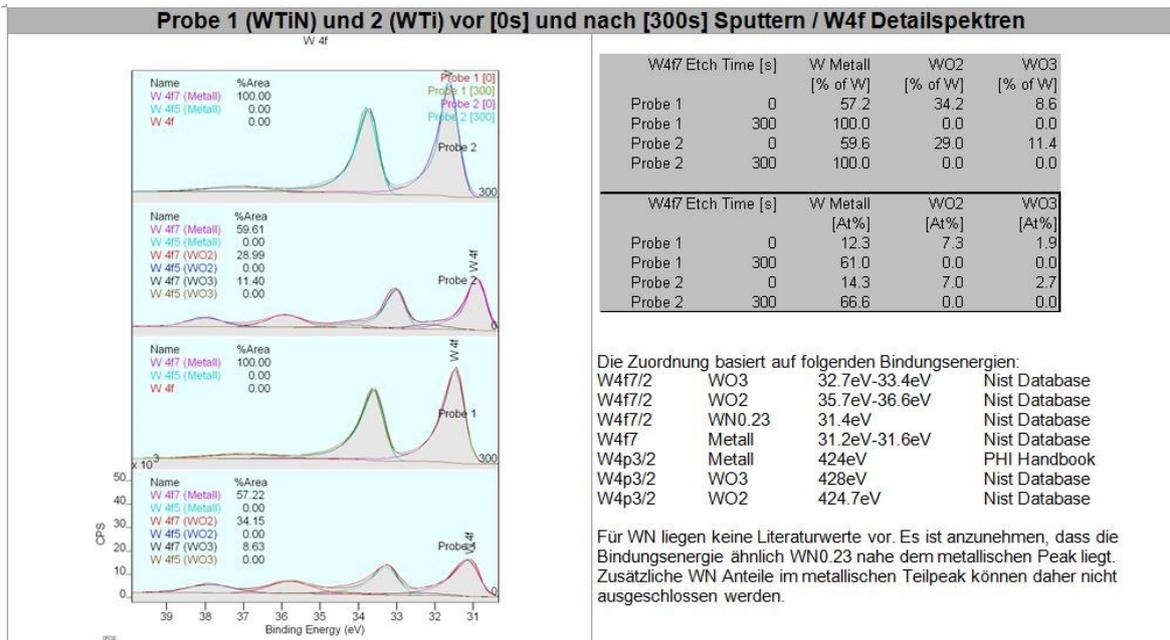


Abbildung A.6: W4f-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.

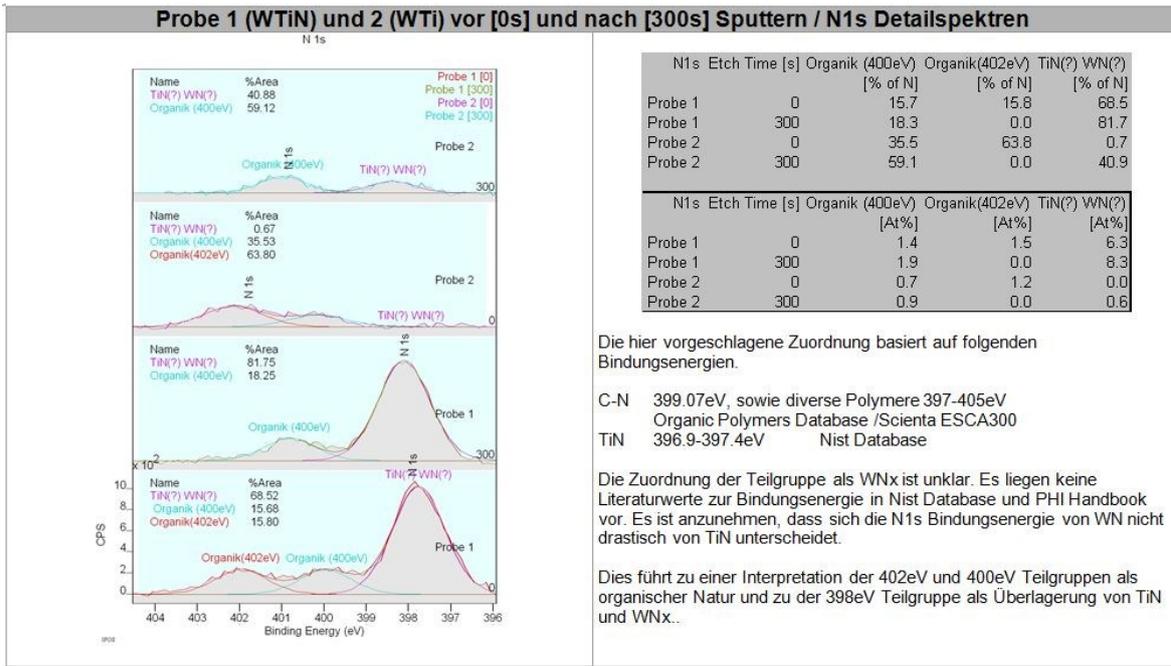


Abbildung A.7: N1s-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.

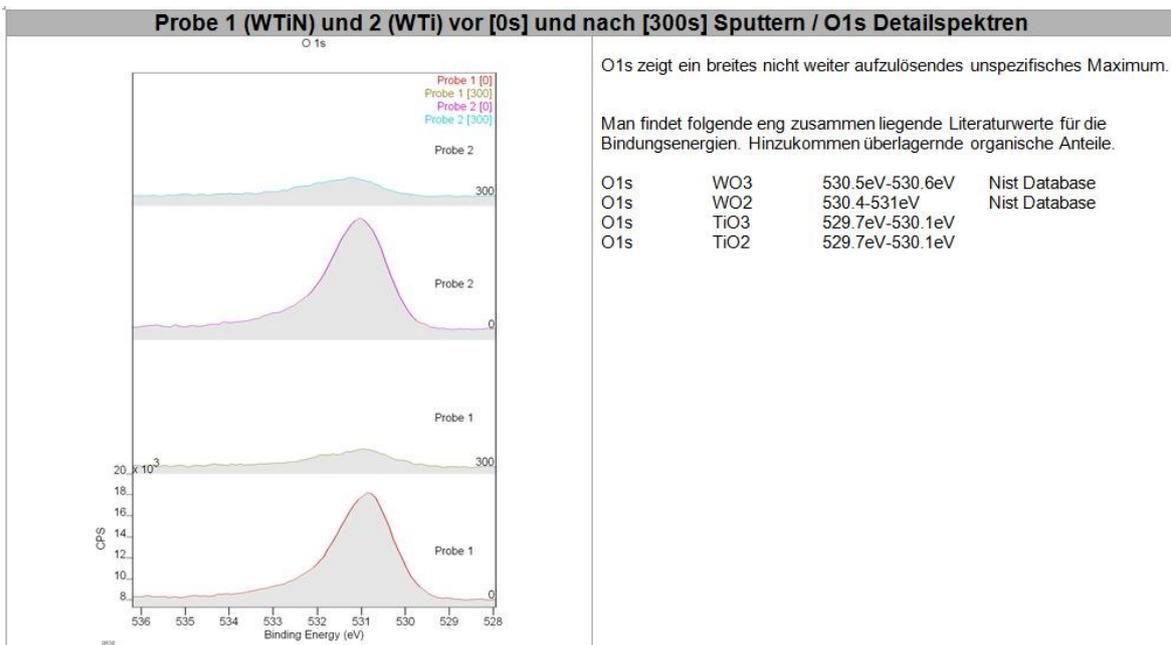


Abbildung A.8: O1s-Detailspektren. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s.

Abkürzungsverzeichnis

At.-%	Atomprozent
bcc	Kubisch raumzentriertes Kristallgitter (<i>body centered cubic</i>)
BF	Hellfeld (<i>bright field</i>)
cts	Zählrate pro Sekunde (<i>counts per second</i>)
CVD	Chemische Gasphasenabscheidung (<i>chemical vapour deposition</i>)
DC	Gleichstrom (<i>direct current</i>)
DF	Dunkelfeld (<i>dark field</i>)
EDX	Energiedispersive Röntgenspektroskopie (<i>energy dispersive X-ray spectroscopy</i>)
EELS	Elektronenenergieverlustspektroskopie (<i>electron energy loss spectroscopy</i>)
fcc	Kubisch flächenzentriertes Kristallgitter (<i>face centered cubic</i>)
FIB	Fokussierter Ionenstrahl (<i>focused ion beam</i>)
FZ	Float-Zone
Gew.-%	Gewichtsprozent
HAADF	<i>High Angle Annular Dark Field</i>
HF	Hochfrequenz (<i>high frequency</i>)
HL	Halbleiter
HRSTEM	Hochauflösendes Rastertransmissionselektronenmikroskop (<i>high resolution scanning transmission electron microscope</i>)
HV	Hochspannung (<i>high voltage</i>)
iC	<i>Integrated circuit</i>
IGBT	<i>Insulated Gate Bipolar Transistor</i>
LMIG	<i>Liquid Metal Ion Gun</i>
MOSFET	Metal-Oxid-Silizium-Feld-Effekt-Transistor (<i>metal-oxide-semiconductor-field-effect-transistor</i>)
PECVD	Plasmaunterstützte chemische Gasphasenabscheidung (<i>plasma enhanced chemical vapour deposition</i>)
PES	Photoelektronenspektroskopie
pin	pn-Diode mit intrinsischer Zwischenschicht zur Erhöhung der Sperrspannung
ppm	Teile von einer Million (<i>parts per million</i>)

PSG	Phosphor-dotiertes Silikatglas (<i>phosphorus doped silicon glass</i>)
PVD	Physikalische Gasphasenabscheidung (<i>physical vapour deposition</i>)
REM	Rasterelektronenmikroskop
RF	Hochfrequenz (<i>radio frequency</i>)
RFA	Röntgenfluoreszenzanalyse
RFS	Röntgenfluoreszenzspektroskopie
RLZ	Raumladungszone
ROI	<i>Region of Interest</i>
RTEM	Rastertransmissionselektronenmikroskop
SE	Sekundärelektron
SIMS	Sekundärionen-Massenspektrometrie (<i>secondary ion mass spectrometry</i>)
TEM	Transmissionselektronenmikroskop
TLM	<i>Transmission Line Measurement</i>
TRIM	<i>Transport of ions in matter</i>
TXRF	Totalreflexions Röntgenfluoreszenzanalyse (<i>total reflection X-ray fluorescence analysis</i>)
UPS	Ultraviolettphotoelektronenspektroskopie (<i>ultraviolet photoelectron spectroscopy</i>)
XPS	Röntgenphotoelektronenspektroskopie (<i>X-ray photoelectron spectroscopy</i>)
XRD	Röntgendiffraktometrie (<i>X-ray diffraction</i>)

Symbolverzeichnis

λ	nm	Wellenlänge
ρ	$\Omega \text{ m}$	Spezifischer elektrischer Widerstand
θ_B	$^\circ$	Winkel des reflektierten Röntgenstrahls
c	mol m^{-3}	Konzentration
C_s	Atome/cm^3	Dotierkonzentration
D	$\text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	Diffusionskoeffizient
D_i	Atome/cm^2	Implantationsdosis
E_{Ar}	eV	Initialenergie von Ar beim Sputterprozess
E_{Arbs}	eV	Energie der rückgestreuten Ar-Ionen
E_B	eV	Bindungsenergie
E_{BS}	eV	Energie der rückgestreuten Atome
E_i	keV	Implantationsenergie
E_{kin}	eV	Kinetische Energie
E_s	kN/mm^2	Elastizitätsmodul
E_{Xe}	eV	Initialenergie der Xe-Ionen
E_{Xebs}	eV	Energie der rückgestreuten Xe-Ionen
F_S	cN	Scherkraft (zerstörend an Bonddraht gemessen)
H	μm	Substratdicke
$h\nu$	eV	Photonenenergie
I	A	Strom
i_F	A	Strom in Durchlassrichtung (Diode)
i_R	A	Strom in Sperrrichtung (Diode)
J	$\text{mol m}^{-2} \text{ s}^{-1}$	Diffusionsstrom
N_{Ar}	n	Gesamtanzahl an Ar-Ionen
N_{Arbs}	n	Anzahl rückgestreuter, neutralisierter Ar-Ionen
N_{Xe}	n	Gesamtanzahl an Xe-Ionen
N_{Xebs}	n	Anzahl rückgestreuter, neutralisierter Xe-Ionen
P	mbar	Druck
Q	eV	Aktivierungsenergie
R	cm	Biegeradius
R_{\square}	Ω	Schichtwiderstand
R_0	cm	Initialer Biegeradius

R_C	Ω	Kontaktwiderstand
R_{Cn}	Ω	Kontaktwiderstand auf n-dotiertem Gebiet
R_{Cp}	Ω	Kontaktwiderstand auf p-dotiertem Gebiet
R_G	Ω	Gatewiderstand
R_T	K	Raumtemperatur (20 °C)
R_W	Ω	Wannenwiderstand
t	S	Zeit
T	K	Temperatur
t_f	μm	Schichtdicke der Dünnschicht
T_h		Homologe Temperatur
T_m	K	Schmelztemperatur
T_m		Energietransfer
T_s	K	Substrattemperatur
U	V	Spannung
U_{BR}	V	Durchbruchspannung
U_{CE}	V	Spannungsabfall über dem IGBT-Transistor bei Nennstrom
u_F	V	Spannungsabfall in Durchlassrichtung (Diode)
U_G	V	Gatespannung (IGBT)
U_{GEth}	V	Einsatzspannung eines IGBT-Transistors
u_R	V	Sperrspannung (Diode)
U_{Th}	V	Schwellspannung, Threshold-Spannung (IGBT)
σ_f	GPa	Schichtstress
σ_i	GPa	Intrinsischer Schichtstress
σ_t	GPa	Thermisch induzierter Schichtstress
ν_s		Poisson-Zahl

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1:	Kennlinie einer pn-Diode. Der Maßstab der y-Achse ist für die Durchlasskennlinie (i_F) und die Sperrkennlinie (i_R) unterschiedlich [2].	5
Abbildung 2.2:	Schematische Darstellung einer pin-Diode [5].	6
Abbildung 2.3:	Schematische Darstellung eines IGBT-Transistors [2].	7
Abbildung 2.4:	Ersatzschaltbild eines IGBTs a) vereinfacht für den Normalbetrieb und b) komplett für Normal- und Überlastbetrieb [2].	9
Abbildung 2.5:	Phasendiagramm Aluminium-Silizium [7]. In der linken oberen Bildhälfte befindet sich eine Vergrößerung des Bereichs 0 - 2 Gew.-% Si.	10
Abbildung 2.6:	REM-Schliffbild eines Al-Spikes auf einem (100)-orientierten Si-Wafer. Die Al-Metallisierung wurde für verbesserte Sichtbarkeit der Spikes selektiv zu Si entfernt.	12
Abbildung 2.7:	Si-Ausscheidungen in Al-Metallisierungen. a) REM-Aufsicht auf eine Halbleiterstruktur mit nasschemisch entferntem AlSiCu, b) FIB-Schnitt einer Halbleiterstruktur mit Si-Ausscheidungen nahe an PSG-Trennschichten.	13
Abbildung 2.8:	REM-Schliffbild eines Trench-IGBT-Transistors mit einer Diffusionsbarriere aus WTi (300 nm) und AlCu als Metallisierung (3200 nm).	15
Abbildung 3.1:	Schematische Darstellung einer PVD-Sputterkammer mit Magnetron.	17
Abbildung 3.2:	Strukturzonenmodell nach <i>Thornton</i> [23] zur Beschreibung des Zusammenhangs zwischen Sputterdruck und homologer Temperatur.	18
Abbildung 3.3:	Schematische Darstellung einer isotropen vs. anisotropen Ätzung [22].	20
Abbildung 3.4:	Schematische Darstellung eines Rasterelektronenmikroskops [30].	22
Abbildung 3.5:	Schematische Darstellung des Strahlenganges an der Objektivlinse eines TEM-Mikroskops [33].	25
Abbildung 3.6:	Schematische Darstellung der Streuung von Röntgenstrahlung an zwei Netzebenen einer kristallinen Substanz [33].	26
Abbildung 3.7:	a) Schematische Darstellung eines ToF-SIMS-Messgeräts von der Primärionenquelle bis zur Spektrumgenerierung [38], b) reale Aufnahme während der Spektrengenerierung in einen ToF-SIMS Messgerät.	29
Abbildung 3.8:	Zusammenhang zwischen Sputterraster und Analysebereich (ROI, <i>region of interest</i>) anhand eines Sputterkraters an einer Barrierentestscheibe nach ToF-SIMS Analyse.	30
Abbildung 3.9:	Spezifischer Kontaktwiderstand R_c von Al zu p- und n-dotiertem, einkristallinen Si [48].	32

Abbildung 4.1:	Schematische Darstellung des Diffusionswegs über a) große Körner und b) kleine Körner verglichen mit der Schichtdicke d_f	33
Abbildung 4.2:	Al-Bonddraht auf einem Trench-IGBT-Chip.....	34
Abbildung 5.1:	REM-Analyse des Al-Spikings auf einem Si-Substrat (100) nach a) HTS-Test bei 400 °C für 14 h, b) HTS-Test bei 400 °C für 24 h und c) der anisotropen Ätzung von Si-Substrat (100) mit KOH und Isopropanol [22]. In Abbildung a) und b) wurden die Barrierenschicht WTi und die Metallisierung AlCu nasschemisch entfernt.	40
Abbildung 5.2:	REM-Aufnahme als a) Aufsicht und b) Querschliff von Al-Spiking auf (111)-Si-Substrat nach HTS-Belastung bei 400 °C für 8 h.....	42
Abbildung 5.3:	Al-Spikewachstum auf unterschiedlich geschädigtem Si-Substrat nach HTS-Test bei 400 °C für 14h und Vergleich mit TRIM-Simulationsergebnissen der Eindringtiefen der implantierten Dotierstoffe (Peak: maximale Dotierstoffkonzentration, EoR (<i>End of Range</i>): maximale Dotierstofftiefe). ..	44
Abbildung 5.4:	Herstellung und Einteilung der Proben in die drei Gruppen der Testwafer.	47
Abbildung 5.5:	Phasendiagramm Titan-Wolfram [7].	49
Abbildung 5.6:	TRIM-Simulation der Anzahl rückgestreuter Ar-Atome (N_{Arbs}) in Abhängigkeit zu ihrer, relativ zur Initialenergie (E_{Ar}), reflektierten Energie E_{Arbs} . 52	
Abbildung 5.7:	Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30At.-%Ti/ 70At.-%W).....	53
Abbildung 5.8:	Schichtstress (σ_f) der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	54
Abbildung 5.9:	Schichtwiderstand (R_{\square}) der WTi-Dünnschicht (100 nm) in Abhängigkeit von Sputterdruck (p_{Ar}) und Bias (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	55
Abbildung 5.10:	TRIM-Simulation der Anzahl der rückgestreuten Xe-Atome (N_{Xebs}) in Abhängigkeit von ihrer, relativ zur Initialenergie (E_{Xe}), reflektierten Energie (E_{Xebs})......	57
Abbildung 5.11:	Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Edelgas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	58
Abbildung 5.12:	Pyrometrisch ermittelte Temperatur während der Abscheidung von WTi in Abhängigkeit vom Sputtergas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).....	59
Abbildung 5.13:	Schichtstress (σ_f) von WTi in Abhängigkeit vom Sputtergas (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	60
Abbildung 5.14:	Schichtwiderstand (R_{\square}) der WTi-Dünnschicht (100 nm Dicke) in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).....	61
Abbildung 5.15:	Schichtstress (σ_f) der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	62

Abbildung 5.16: Ti-Gehalt der WTi-Dünnschicht in Abhängigkeit vom Partialfluss (WTi-Target: 30 At.-% Ti/ 70 At.-% W).	63
Abbildung 5.17: a) REM-Aufnahme einer WTi-Dünnschicht (200 nm) auf Si-Substrat, b) Aufnahme einer TEM-Lamelle von Al (1000 nm)/WTi (50 nm) auf Si-Substrat. 65	65
Abbildung 5.18: REM-Aufsicht auf eine 300 nm dicke, trockenchemisch strukturierte WTi-Dünnschicht auf SiO ₂	66
Abbildung 5.19: Röntgendiffraktionsspektrum von WTi (100 nm) auf Si-Substrat (100). 67	67
Abbildung 5.20: Auger-Elementmapping von a) W und b) Ti an WTi-Oberfläche.	68
Abbildung 5.21: Röntgendiffraktionsspektrum von WTiN (100 nm dick, gesputtert mit Partialfluss 0,33) auf Si-Substrat (100).	69
Abbildung 5.22: TEM-Analysen an WTiN auf Si (100) unter Al. a) HRSTEM-Aufnahme DF- Detektor, b) vergrößerte HRSTEM-Aufnahme im DF-Detektor und c) HRSTEM-Aufnahme mit HAADF-Detektor.	70
Abbildung 5.23: HRSTEM-Analyse von WTiN mit einem HAADF-Detektor und dazugehörigem Ausschnitt eines EELS-Spektrums.	71
Abbildung 5.24: REM-Aufsicht auf eine Probe mit abgelöstem AlCu nach HTS-Test bei 450 °C für 14 h. Auf dem Si sind noch Reste der abgelösten WTi-Barriere ersichtlich. EDX Pos 13: C, Si, O; EDX Pos 14: C, O, W, Al (Abbildung 5.25). 76	76
Abbildung 5.25: Ausgewähltes EDX-Spektrum Pos 14 aus Abbildung 5.24 von einer getemperten WTi-Schicht nach Tempern bei 450 °C für 14 h.	76
Abbildung 5.26: TXRF-Spektrum einer Si/WTi/AlCu-Probe nach a) Abscheidung und b) nach HTS-Test bei 450 °C für 14h.	77
Abbildung 5.27: SIMS-Tiefenprofil von Si/WTi/AlCu a) nach Abscheidung und b) nach zusätzlicher Temperaturbelastung von 400 °C für 14 h in inerter Atmosphäre. 78	78
Abbildung 5.28: SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu (1000 nm)/WTi (100 nm) nach a) Abscheidung, b) 350 °C, c) 375 °C, d) 400 °C HTS-Test bei jeweils drei Belastungszeiten.	81
Abbildung 5.29: Vergleich der schematischen Penetrationskurve nach <i>Lundy et al. [76]</i> mit der experimentell ermittelten SIMS-Diffusionskurve von Ti in Al nach HTS-Test bei 400 °C für 14 h. Abschnitt 3 ist an der experimentell ermittelten Diffusionskurve um circa 50% gekürzt.	82
Abbildung 5.30: Schematische Darstellung des Ti-Diffusionswegs in Si/WTi/AlCu nach Temperatur-belastung.	83
Abbildung 5.31: Relative Ti-Intensität in Bereich 2 (ca. 1100 Sputtersekunden.) der Diffusionskurve in Abhängigkeit der Zeit im HTS-Test bei 400 °C.....	84

- Abbildung 5.32: *Arrhenius*-Graph für die Ti-Diffusion bei 350 °C, 375 °C und 400 °C. 85
- Abbildung 5.33: Al-Spiking-Analyse nach HTS-Test bei 400 °C für 4 h a) REM an W18,9Ti [At.-%] und b) Lichtmikroskop an W24Ti [At.-%] Barriere nach Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung. 86
- Abbildung 5.34: Einfluss des Sputterdrucks auf die Abscheidung von WTi anhand des Thornton Modells: TEM-Aufnahme von WTi, abgeschieden bei a) 9×10^{-2} mbar [69] und b) 1×10^{-3} mbar mit 2 kW Leistung und ohne Bias 87
- Abbildung 5.35: TEM-Aufnahmen von WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leitung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar, b) Kr und c) Xe als Sputtergas. 88
- Abbildung 5.36: REM-Aufnahmen von WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leitung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar, b) Kr und c) Xe als Sputtergas nach HTS-Test bei 400 °C für 8 h und nach Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung. 88
- Abbildung 5.37: REM-Aufnahmen von 50 nm dicken WTi-Dünnschichten gesputtert mit 2 kW Leitung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar ohne N₂, b) Ar mit 0,2 N₂-Partialfluss c) Ar mit 0,33 N₂-Partialfluss nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h und Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung. 90
- Abbildung 5.38: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h. 91
- Abbildung 5.39: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Si in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 16 h. 91
- Abbildung 5.40: REM-Aufnahmen von 50 nm dicken WTi-Dünnschichten gesputtert bei 2 kW Leitung, 1×10^{-3} mbar Prozessdruck, ohne Bias und a) Ar ohne N₂, b) Ar mit 0,2 N₂-Partialfluss c) Ar mit 0,33 N₂-Partialfluss nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h und Ablösung der Barrierenschicht und der Metallisierung. 92
- Abbildung 5.41: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h. 93
- Abbildung 5.42: ToF-SIMS-Tiefenprofile von Si in AlCu nach HTS-Test bei 400 °C für 24 h. 93
- Abbildung 5.43: REM-Abbildungen einer IGBT-Trench-Technologie mit WTiN-Diffusionsbarriere und AlCu-Metallisierung. a) Übersichtsaufnahme der Zellenstruktur und b) Detailaufnahme einer Zelle..... 95
- Abbildung 5.44: REM-Analyse und EDX-Elementmapping von Topographiestufen in einem Aspektverhältnis von 4 zu 1 (Breite zu Tiefe) mit WTi als Diffusionsbarriere. 96
- Abbildung 5.45: Schematische und REM-Darstellung der Strukturierungsmöglichkeiten der Barrieren- und Metallisierungsschicht am Beispiel von WTi(N) und AlCu auf einem Leistungshalbleiter..... 97

Abbildung 5.46: TEM-Analyse mit EDX-Linescan über die Al/ WTi-Grenzfläche, die über einen ex situ Prozess strukturiert wurde.	98
Abbildung 5.47: Emissionsspektrum der Ätzung von 3 μm AlCu und 100 nm WTi....	100
Abbildung 5.48: Relative Kontaktwiderstände auf a) n-dotiertem Bereich und b) p-dotiertem Bereich von WTi, WTiN _{0,2} und WTiN _{0,33} im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung	101
Abbildung 5.49: Relativer Spannungsabfall über einem IGBT-Transistors bei Nennstrom und Verwendung von WTi-, WTiN _{0,2} - und WTiN _{0,33} -Barrieren mit AlCu verglichen mit AlSiCu als Metallisierung.....	102
Abbildung 5.50: Relative Einsatzspannung eines IGBT-Transistors bei Verwendung von WTi-, WTiN _{0,2} - und WTiN _{0,33} -Barrieren mit AlCu verglichen mit AlSiCu als Metallisierung.	103
Abbildung 5.51: Einfluss der ex situ Abscheidung mit einer Lackablösung durch Sauerstoffplasma auf a) den Kontaktwiderstand auf n ⁺ -Si (R_{Cn^+}), b) den Kontaktwiderstand auf p ⁺ -Si (R_{Cp^+}), c) den Gatewiderstand (R_G) und d) den Spannungsabfall über den IGBT-Transistor (U_{CE}).	105
Abbildung 5.52: Keramisches Substrat mit aufgelötetem IGBT-Barrierenchip.	106
Abbildung 5.53: Scherwerte von Al _{0,5} Mg-Bonddrähten auf unterschiedlichen Chip-Metallisierungs-systemen.	108
Abbildung 5.54: Relative Anzahl der Bondfehler mit AlMg _{0,5} -Draht aufgrund von Kraterbildung oder Metallablösung auf unterschiedlichen Chipmetallisierungen.	109
Abbildung 5.55: Optische Mikroskopaufnahme von Metallablösungen auf IGBT-Barrierenchips mit WTiN _{0,33} /AlCu-Metallisierungen nach Bonden mit Al _{0,5} Mg-Draht.	110
Abbildung 5.56: Kraterbildung durch Bonden von Al _{0,5} Mg auf einer AlSiCu-Metallisierung.	111
Abbildung 5.57: TEM-Aufnahme einer WTi-Diffusionsbarriere mit AlCu-Metallisierung in einem besonders tiefen Kontaktloch mit 1,6 μm Tiefe.....	113
Abbildung 5.58: Vergleich unterschiedlicher WTi-Barrieren bezüglich ihrer Barrierenwirkung gegenüber Al/Si-Diffusion bei 400 °C Temperaturbelastung.	115
Abbildung 7.1: Vergleich des a) Schichtstress σ_f und b) Schichtwiderstands R_{\square} von Ta und TaN mit den evaluierten WTi-Dünnschichten.....	121
Abbildung 7.2: Barrierenwirkung von Ta und TaN gegenüber Al/ Si-Diffusion bei 400 °C Temperaturbelastung verglichen mit den getesteten WTi-Barrieren.	122
Abbildung 7.3: TEM-Analyse mittels BF-Detektor an Ta (100 nm) mit AlCu (3200 nm) als Metallisierung.....	123

- Abbildung 7.4: Relative Kontaktwiderstände auf a) n-dotierten Bereich und b) p-dotierten Bereich von WTi, WTiN_{0,2}, WTiN_{0,33}, Ta und TaN_{0,2} im Vergleich zur AlSiCu-Metallisierung..... 124
- Abbildung A.1: SIMS-Tiefenprofile von Ti in AlCu (1000 nm)/WTi (100nm) nach a) Abscheidung, b) 350 °C, c) 375 °C, d) 400 °C HTS-Test für jeweils drei Belastungszeiten. 125
- Abbildung A.2: Relative Ti-Intensität in Bereich 2 der Diffusionskurve in Abhängigkeit der Zeit im HTS-Test bei a) 350 °C, b) 375 °C und c) 400 °C. 126
- Abbildung A.3: XPS-Übersichtsspektren vor (0 s) und nach (300 s) Sputterabtrag. Konzentrationsangaben in At.-%. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s..... 127
- Abbildung A.4: C1s-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie des dominierenden C1s-Teilpeaks von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s. 127
- Abbildung A.5: Ti2p-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s..... 128
- Abbildung A.6: W4f-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s..... 128
- Abbildung A.7: N1s-Detailspektren mit Entfaltung. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s..... 129
- Abbildung A.8: O1s-Detailspektren. Die Spektren wurden bzgl. aufladungsbedingter Shifts auf eine einheitliche C1s-Bindungsenergie von 285 eV (Alkane) verschoben. Gleiche Einstellungen der Ionenkanone (2 kV Ar⁺) führen zu einem Sputterabtrag auf Ta₂O₅ < 3 nm pro 1 min, bzw. < 15 nm pro 300 s... 129

Tabellenverzeichnis

Tabelle 4.1:	Ausgewählte Elemente zur Anwendung als Dünnschichtbarrieren und ihre Eigenschaften.....	37
Tabelle 5.1:	Errechnete Werte der Energieüberträge für Ti- und W-Sputtern mit Ar...	50
Tabelle 5.2:	Errechnete Werte der Energieüberträge für Ti- und W-Sputtern mit Xe als Sputtergas	56
Tabelle 5.3:	Übersicht und Kategorisierung der Probenherstellung von WTi-Testwafern	64
Tabelle 5.4:	Vergleich der gemessenen und berechneten Werte der Kristallgröße für WTi und WTiN anhand der Röntgendiffraktionspektren aus Abbildung 5.19 und Abbildung 5.21	69
Tabelle 5.5:	XPS-Analyseergebnisse von WTi und WTiN	72
Tabelle 5.6:	Übersicht der HTS-Bedingungen zur Ermittlung der Aktivierungsenergie nach Arrhenius.....	80
Tabelle 5.7:	Auswahl der WTi-Barrieren zur Integration in einen Leistungshalbleiter	94
Tabelle 5.8:	Prozessschritte der Strukturierungsmethoden A und B aus Abbildung 5.45	97
Tabelle 7.1:	Ausgewählte Prozessparameter der getesteten Ta- und TaN-Barrierendünnschichten	120

Literaturverzeichnis

- [1] Bargel, Hans-Jürgen ; Schulze, Günter: *Werkstoffkunde*. Berlin : Springer, 2005
- [2] Specovius, Joachim: *Grundkurs Leistungselektronik*. Wiesbaden : Vieweg, 2013
- [3] Hofmann, Peter: *Hybridfahrzeuge*. Wien : Springer-Verlag/Wien, 2010
- [4] Binder, A: Was treibt den ICE 3 und den Transrapid, Vortrag Technische Universität Darmstadt. Vortrag. (2011)
- [5] Lutz, Josef: *Halbleiter-Leistungselemente*. Chemnitz : Springer Vieweg, 2012
- [6] Koprowski, Angelika: »Einfluss von Sauerstoff-Plasma-Prozessen auf die Ladungsträgerlebensdauer in Leistungshalbleitern«. Karl-Franzens-Universität Graz, Graz, Dissertation 2012
- [7] Massalski, T. B.: Binary Alloy Phase Diagrams. CD-ROM. (1990)
- [8] Mehrer, H.: »1. General Introduction«. In: *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology - Diffusion in Solid Metals and Alloys*. : Springer Materials - The Landolt-Börstein Database, Kap. Group III Condensed Matter
- [9] McCaldin, J. O. ; Sankur, H.: »Diffusivity and Solubility of Si in the Al metallization of Integrated Circuits«. In: *Applied Physics Letter*, Bd. 19, Nr. 12, S. 524-527, Dez 1971
- [10] Dugan, M. Patric ; Tsakalagos, Thomas: »Low Temperature Characterisation of Al-Si Diffusion Kinetics«. In: *Superlattices and Microstructures*, Bd. 4, Nr. 4/5, S. 565-570, 1988
- [11] Börnstein, Landolt: Diffusion in Silicon. Springer Materials Database. (2013)
- [12] Schwartz, G. C. ; Srikrishnan, K. V.: *Handbook of Semiconductor Interconnection Technology*. 2nd Aufl. Boca Raton : Taylor Francis, 2006
- [13] Gulp van, G. J.: »Diffusion-limited Si precipitation in evaporated Al/Si films«. In: *J. Appl. Phys.*, Bd. 44, Nr. 5, S. 2040-2050, May 1973

- [14] Onuki, Jin ; Koizumi, Masahiro: »Effect of Si Precipitation on Damage in Ultrasonic Bonding of Thick Al wire«. In: *Materials Transactions*, Bd. 37, Nr. 6, S. 1319-1323, 1996
- [15] Onuki, Jin ; Koizumi, Masahiro ; Suwa, Masateru: »Reliability of Thick Al Wire Bonds in IGBT Modules for Traction Motor Drives«. In: *IEEE Transactions on Advanced Packaging*, Bd. 23, Nr. 1, S. 108-112, Feb 2000
- [16] Hirashita, Norio ; Kinoshita, Masako ; Ajioka, Tsuneo: »Direct Observation of Solid-Phase Epitaxial Growth of Si at Contact Holes Through Al-Si Alloy«. In: *Journal of the Electrochemical Society*, Bd. 135, Nr. 12, S. 3159-3160, Jul 1988
- [17] Witvrouw, A. ; Roussel, P. ; Beyer, G. ; Proost, J. ; Maex, K.: »Incubation, time-dependent drift and saturation during Al-Si-Cu electromigration: Modelling and implications for design«. In: *Proc. Intl. Interconnect Technology Conference*, Burlingame, USA, 1998, S. 27-29
- [18] Infineon Technologies: (2013, Feb.) Infineon Technologies Datenblätter IGBT3 1700V 150A High Power. [Online]
<http://www.infineon.com/cms/en/product/channel.html?channel=ff80808112ab681d0112ab6a7d91052a>
- [19] Schilling, O. ; Schäfer, M. ; Mainka, K. ; Thoben, M. ; Sauerland, F.: »Power cycling testing and FE modelling focussed on Al wire bond fatigue in high power IGBT modules«. In: *Microelectronics Reliability*, Nr. 52, S. 2347-2352, Okt 2012
- [20] Menz, Wolfgang ; Mohr, Jürgen ; Paul, Oliver: *Mikrosystemtechnik für Ingenieure*. 3. auflage Aufl. Weinheim : Wiley-VCH, 2005
- [21] Rockett, Angus: *The Materials Science of Semiconductors*. Urbana, USA : Springer Science and Media, 2008
- [22] Völklein, Friemann ; Zetterer, Thomas: *Praxiswissen Mikrosystemtechnik*. 2., vollst. überarb. u. erw. Aufl. Aufl. : Springer Vieweg, 2006
- [23] Thornton, J.A.: »The microstructure of sputter-deposited coatings«. In: *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum Surfaces and Films*, Bd. 4, Nr. 6, S. 3059-3065, 1986

- [24] Oerlein, G.: »Reactive Ion Etching«. In: *Handbook of Plasma Processing Technology* // Westwood, W. D. (Hrsg.). Park Ridge, New Jersey : Noyes Publications, 1990, Kap. 8, S. 196-232
- [25] Köhler, M.: *Ätzverfahren für die Mikrotechnik*. Weinheim : Wiley-VCH, 1998
- [26] Görgen, W.: *Prozessentwicklung zur Herstellung teilbeweglicher Mikrostrukturen mit dem LIGA-Verfahren, Diplomarbeit FH Wiesbaden*. Wiesbaden, 1995
- [27] Frey, H.: *Dünnschichttechnologie* // Kienel, G. (Hrsg.). Düsseldorf : VDI-Verlag, 1987
- [28] Kinbara, Akira: »Sputtering«. In: *Encyclopedia of Applied Physics*. : Wiley-VCH, 2004, S. 437-455
- [29] Janssen, G. C. A. M. ; Abdalla, M. M. ; Keulen, F. van ; Pujada, B. R. ; Venrooy, B. van: »Celebrating the 100th anniversary of the stoney equation for film stress: Developments from polycrystalline steel strips to single crystal silicon wafers«. In: *Thin Solid Films*, Nr. 517, S. 1858-1867, 2009
- [30] Jeol: (2013, Jun) Jeol Website-Applications-Basic Knowledge For Using The SEM. [Online] http://www.jeol.co.jp/en/applications/pdf/sm/sem_atoz_all.pdf
- [31] Lloyd, Geoffrey E.: »Atomic number and crystallographic contrast images with the SEM: a review of backscattered electron techniques«. In: *Mineralogical Magazine*, Bd. 51, S. 3-19, Mar 1987
- [32] Gauglitz, Guenter ; Tuan, Vo-Dinh: »Methods:4: Elemental Analysis«. In: *Handbook of Spectroscopy*. : Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005, Kap. Section V, S. 363-493
- [33] Psutka, S. ; Hofer, F.: *Handbuch der Nanaoanalytik Steiermark*. 2. Aufl. Weiz, Österreich : NanoTecCenter Weiz Forschungsgesellschaft mbH, 2010
- [34] Gai, Pratibha L u. a.: »Atomic Resolution Environmental Transmission Electron Microscopy for Probing Gas-Solid Reactions in Heterogeneous Catalysis«. In: *Materials Research Society Bulletin*, Bd. 32, Nr. 12, S. 1044-1050, 2007
- [35] Shindo, D. ; Murakami, Y.: »Fundamentals of Characterization«. In: *Morphology Control of Materials and Nanoparticles, Springer Series in Materials Science*.

- : Springer Berlin Heidelberg, 2004, Kap. 7, S. 153-181
- [36] Benninghoven, A. ; Rüdenauer, F. G. ; Werner, H. W.: *Secondary Ion Mass Spectrometry*. : John Wiley & Sons, Ltd., 1987
- [37] Vickerman, J. C. ; Briggs, D.: *ToF-SIMS: Surface analysis by mass spectrometry*. : IM Publications, 2001
- [38] GmbH, ionTOF: (2013, Jun) ionTOF GmbH Website; Technique; SIMS. [Online] <http://www.ion-tof.com/technique-sims-IONTOF-TOF-SIMS-TIME-OF-FLIGHT-SURFACE-ANALYSIS.htm>
- [39] Beckhoff, Burkhard ; Kanngießner, Birgit ; Langhoff, Norbert ; Wedell, Reiner ; Wolff, Helmut: *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. : Springer, 2006
- [40] Rigaku Corporation and its Global Subsidiaries: (2013, Jun) Rigaku Corporation Website. [Online] <http://www.rigaku.com/products/semi/txrf-v310>
- [41] Maissel, L. I. ; Glang, R.: *Handbook of Thin Film Technology*. New York : McGraw-Hill, 1970
- [42] Hort, Norbert: Einführung in Werkstoffkunde Diffusion, Erholung und Rekristallisation, 2009, Vortrag GKSS Forschungszentrum Geesthacht GmbH, ftp://ftp.hzg.de/pub/hort/unisono/WK_20090205-06_Folien.pdf.
- [43] Nicollian, E. H. ; Sinha, A. K.: *Thin Films: Interdiffusion and Reactions* // Poate, J. M. ; Tu, K. N. ; Mayer, J. W. (Hrsg.). New York : Wiley-Interscience, 1978, S. 481
- [44] Yu, A. Y.C.: »Electron tunneling and contact resistance of metal-silicon contact barriers«. In: *Solid-State Electronics*, Bd. 13, Nr. 2, S. 239-247, Feb 1970
- [45] Berger, H. H.: »Models for contacts to planar devices«. In: *Solid-State Electronics*, Bd. 15, Nr. 2, S. 145-158, Feb 1972
- [46] Schroder, Dieter K: »Contact Resistance and Schottky Barriers«. In: *Semiconductor Material and Device Characterisation*. : John Wiley & Sons, 2006, Kap. 3, S. 127-184

- [47] Slimane, Oussalah ; Boualem, Djezzar ; Robert, Jerisian: »A Comparative study of different contact resistance test structures dedicated to the power process technology«. In: *Solid-State Electronics* , Bd. 49, S. 1617-1622, Aug 2005
- [48] Trapp, O. D. ; Lopp, L. ; Richard, A. ; Blanchard, : *Semiconductor Technology Handbook*. : Technology Associates, 1985
- [49] Dubois, E. ; Larrieu, G. ; Breil, N. ; Valentin, R.: »Metallic Source/Drain for Advanced MOS architectures : from material engineering to device integration«. In: *SINANO-NANOSIL Workshop, Silicon-based CMOS and Beyond-CMOS Nanodevices*, Athens, Greece, 2009
- [50] Barth, H. J. u. a.: »Advanced PVD Ti/TiN liners for contact and via applications«. In: *SPIE - The International Society for Optical Engineering*, Austin, Texas, 1997, S. 1-12
- [51] Wang, Yimin ; Lin, Ray Y.: »Amorphous molybdenum nitride thin films prepared by reactive sputter deposition«. In: *Materials Science & Engineering*, Bd. B, Nr. 112, S. 42-49, 2004
- [52] Mimkes, J.: »Zur Diffusion entlang Korngrenzen und Versetzungen«. In: *Berichte der Deutschen Keramischen Gesellschaft*, Bd. 48, Nr. 8, S. 355-358, 1971
- [53] Bergmann, Wolfgang: *Werkstofftechnik I*. : Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG, 2003
- [54] Neumann, Gerhard ; Tuijn, Cornelius: *Self-diffusion and Impurity Diffusion in Pure Metals*. : Pergamon Materials Series, 2008, Bd. 14
- [55] Riekkinen, T. u. a.: »Reactive sputter deposition and properties of TaN thin films«. In: *Microelectronic Engineering*, Bd. 64, S. 289-297, 2002
- [56] Wang, QingXiang ; Fan, ZhiKang ; Liang, ShuHua: »Thermal stability of nanocrystalline W-Ti diffusion barrier thin films«. In: *Science China Technological Sciences*, Bd. 53, Nr. 4, S. 1049-1055, Apr 2010
- [57] Infineon Technologies, Plappert, Mathias ; Schulze, Hans-Joachim: »Semiconductor Structure, Semiconductor Device Having a Semiconductor Structure, and Method for Manufacturing A Semiconductor Structure«. 13/472.949, 2012

- [58] Nishi, Yoshio ; Doering, Robert: *Handbook of Semiconductor Manufacturing Technology*. Dallas, Texas : Marcel Dekker, Inc., 2000
- [59] Deutsches Institut für Normung: *DIN EN ISO 14644-1: Reinräume und zugehörige Reinraumbereiche - Teil 1: Klassifizierung der Luftreinheit anhand der Partikelkonzentration*. Berlin : Beuth, 2010
- [60] Quirk, Michael ; Serda, Julian: *Semiconductor Manufacturing Technology*. : Prentice Hall, 2000
- [61] Shaginyan, L. R. ; Misina, M. ; Kadlec, S. ; Jastrabik, L. ; Mackova, A.:
»Mechanism of the film composition formation during magnetron sputtering of WTi«. In: *Journal of Vacuum Science and Technology A*, Bd. 19, Nr. 5, S. 2554 - 2568, Sep/Oct 2001
- [62] Shaginyan, L. R. u. a.: »Composition, structure, microhardness and residual stress of W-Ti-N films deposited by reactive magnetron sputtering«. In: *Thin Solid Films*, Bd. 408, S. 136-147, Feb 2002
- [63] Bergstrom, D. B. ; Petrov, I. ; Greene, J. E.: »Al/Ti x W 1-x metal/diffusion-barrier bilayers: Interfacial reaction pathways and kinetics during annealing«. In: *J. Appl. Phys.*, Bd. 82, Nr. 5, S. 2312-2322, Sep 1997
- [64] Olowolafe, J. O. ; Palmstrom, C. J. ; Colgan, E. G. ; Mayer, J. W.: »Al/TiW reaction kinetics: Influence of Cu interface oxides«. In: *J. Appl. Phys.*, Bd. 58, S. 3440-3443, 1985
- [65] Honeywell Electronic Materials: »WTi, Vacuum Hot Pressed Target's«. Honeywell Electronics Materials, Bericht an Kunden 2011
- [66] Sigmund, Peter: »Sputtering by Ion Bombardment: Theoretical Concepts«. In: *Sputtering by Particle Bombardment I / / Behrisch, R. (Hrsg.)*. Berlin Heidelberg : Springer, 1981, Kap. 2, S. 9-71
- [67] Bohr, Niels H. D.: »The Penetration of atomic particles through matter«. In: *Reprinted from Dansk. Vidensk. Selskab, Math.-Fys. Medd*, Bd. 18, Nr. 8, S. 144, 1948
- [68] Shterenfeld-Lavie, Z. u. a.: »Proc. 12th Int. VMIC Conf.« , Santa Clara, CA, 1995, S. 31

- [69] Müller, Matthias: »Diffusionsbarrieren für Kupfer, Vergleich verschiedener Schichtsysteme«. Fachhochschule Regensburg, Regensburg, Diplomarbeit 2006
- [70] Raaijmakers, Ivo J. u. a.: »Microstructure and Barrier Properties of Reactively Sputtered Ti-W Nitride«. In: *Journal of Electronic Materials*, Bd. 19, Nr. 11, S. 1221-1230, 1990
- [71] Palmstrom, C. J. ; Mayer, J. W. ; Cunningham, B. ; Campbell, D. R. ; Totta P. A.: »Thin film interactions of Al and Al(Cu) on TiW«. In: *J. Appl.Phys.*, Bd. 58, Nr. 9, S. 3444-3448, Nov 1985
- [72] Dirks, A. G. ; Wolters, R.A.M. ; Nellissen, A.J.M.: »On the microstructure-property of W-Ti-(N) diffusion barriers«. In: *Thin Solid Films*, Bd. 193-194, Nr. 1, S. 201-210, 1990
- [73] Plappert, M. ; Humbel, O. ; Koprowski, A. ; Nowotnick, M.: »Characterization of Ti diffusion in PVD deposited WTi/AlCu metallization on monocrystalline Si by means of secondary ion mass spectroscopy«. In: *Microelectronics Reliability*, Bd. 52, S. 1993-1997, 2012
- [74] Fugger, Michael u. a.: »Comparison of WTi and WTi(N) as diffusion barriers for Al and Cu metallization on Si with respect to thermal stability and diffusion behavior of Ti«. In: *Microelectronics Reliability*, Nr. eingereicht am 26.08.2013 mit der Referenznummer MR MR-D13-00494, 2013
- [75] Ghate, P. B. ; Blair, J. C. ; Fuller, C. R. ; McGuire, G. E.: »Application of Ti:W Barrier Metallization for integrated circuits«. In: *Thin Solid Films*, Bd. 53, S. 117-128, 1978
- [76] Lundy, T. S. ; Padgett, R. A.: *Trans. AIME*, Nr. 242, S. 1897, 1968
- [77] Kelly, R. G. ; Bardwell, J. A.: »Materials Degradation«. In: *Encyclopedia of Applied Physics.* : Wiley-VCH, 2004, S. 349-364
- [78] van Chi, N.: Technische Universität Bergakademie Freiberg, Neue Hütte 23 (1978) 147, Doktorarbeit 1977
- [79] Liu, Guojuun ; Kuo, Yue: »Reactive Ion Etching of TiW Thin Film«. In: *205th meeting, The Electrochemical Society, Inc.*, 2004, S. Abs. 145

- [80] Lieberman, M. A. ; Lichtenberg, A. J.: *Principles of Plasma Discharges and Materials Processing*. New York : Wiley, 1994
- [81] Fracassi, Francesco ; d'Agostino, Riccardo: »Chemistry of titanium dry etching in fluorinated and chlorinated gases«. In: *Pure & Appl.Chem.*, Bd. 64, Nr. 5, S. 703-707, 1992
- [82] Williams, Kirt R. ; Muller, Richard S.: »Etch Rates for Micromachining Processing«. In: *Journal of Microelectromechanical Systems*, Bd. 5, Nr. 4, S. 256-270, Dez 1996
- [83] MicroChemicals: (2009, Dez.) microchemicals.com. [Online]
www.microchemicals.de/technische_infos/aluminium_aetzen.pdf
- [84] Joint Electron Device Engineering Council(JEDEC): »Test Method: Wire Bond Shear Test, JEDEC JESD22-B116-1998«. In: *Reliability Test Methods for Packaged Devices.*, 1998
- [85] Wang, Caiyuan ; Sun, Ronglu: »The Quality of Wire Bonding«. In: *Modern Applied Science*, Bd. 3, Nr. 12, S. 50-57, Dez 2009
- [86] Infineon Technologies, Werber, Dorothea ; Plappert, Mathias ; Pfirsch, Frank ; Gutt, Thomas: »IGBT with emitter electrode electrically connected with an impurity zone«. 13/941,829, 2013
- [87] Krivec, Stefan: »Investigations of mobile ion transport processes in thin layers upon bias-temperature stress«. Technische Universität Wien, Wien, Doktorarbeit 2011
- [88] Radhakrishnan, K. ; Goek Ing, Ng ; Gopalakrishnan, R.: »Reactive sputter deposition and characterization of tantalum nitride thin films«. In: *Materials Science and Engineering*, Bd. B, Nr. 57, S. 224-227, 1999

Danksagung

Allen Personen, die mich während der Promotion unterstützt haben, sei an dieser Stelle einen herzlichen Dank ausgesprochen. Die Unterstützung seitens aller Mitarbeiter der Firma Infineon Technologies Austria AG und der Universität Rostock war immer exzellent und hat die Ergebnisse dieser Arbeit erst ermöglicht.

Herrn Dr. Oliver Humbel, unter dessen Anleitung ich mich schnell in der Leistungshalbleitertechnologie zu Recht gefunden habe, danke ich für die fachliche Unterstützung und die vielen ausgiebigen Diskussionen.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Mathias Nowotnick bedanke ich mich für die Möglichkeit und das Vertrauen, dass ich unter seiner Anleitung diese Dissertation anfertigen konnte. Die Unterstützung war trotz 1000 km Entfernung immer vorbildlich.

Herrn Dr. Krivec sei ein herzliches Dankeschön für die fachlichen Diskussionen bis in die Abendstunden hinein ausgesprochen. Herrn Dr. Krivec, Herrn Dr. Joshi, Herrn Harrison und Herrn Steinbrenner möchte ich zudem für die Unterstützung an den Sputteranlagen danken. Ein besonderer Dank gilt Herrn Narahashi für die unzähligen Versuche an den Plasmaätzenanlagen.

Herrn Thomas Gutt und Herrn Dr. Wolter danke ich für die vielen Debatten zum Thema „Aktivierungsenergie“. Herrn Thomas Gutt danke ich zusätzlich für das Netzwerken zu den weiteren Infineon Standorten an denen Analysen durchgeführt wurden.

Michael Fugger und Ao. Univ. Prof. Dr. techn. Herbert Hutter und dem Team des Instituts „Chemical Technologies and Analytics“ danke ich für die sehr gute Zusammenarbeit.

Den Führungskräften, Herrn Dr. Neidhart und Herrn Grätz, der „Frontend Technology Villach“ danke ich für die Möglichkeit der Durchführung und der Finanzierung dieser Arbeit.

Für die freundliche Aufnahme, die Einarbeitung und die Unterstützung bei den, nicht immer verständlichen, Geschäftsprozessen danke ich Fr. Dr. Koprowski.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner Freundin Katharina bedanken, die mich stets mental und fachlich motiviert hat. Ihre Ruhe und Verständnis, während aller Phasen der Doktorarbeit, gab mir die nötige Kraft und Ausdauer.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und ohne fremde Hilfe angefertigt habe. Es wurden nur die in der Arbeit ausdrücklich benannten Quellen und Hilfsmittel benutzt. Die wörtlich oder inhaltlich entnommenen Stellen aus benutzten Werken habe ich als solches kenntlich gemacht.

Datum, Ort

Unterschrift

Thesen

1. Die Integration einer Diffusionsbarriere steigert die Qualität und Ausbeute sowohl in der Chip- als auch in der Modulfertigung, da sie den Einsatz einer Si-freien Al-Metallisierung ermöglicht.
2. Die Integration einer Diffusionsbarriere setzt eine detaillierte Kenntnis der Barrierenwerkstoffe und deren Einfluss auf einen Leistungshalbleiter voraus.
3. Eine Ti-Diffusion aus der WTi-Dünnschicht in Aluminium stellt den Fehlermechanismus bei dem Versagen von WTi-Barrieren dar.
4. Der reaktive Sputterprozess von WTiN-Dünnschichten unterbindet die Ti-Diffusion und ermöglicht eine höhere Temperaturstabilität gegenüber Diffusion von Al und Si.
5. Experimentelle, theoretische und simulative Ergebnisse zeigen, dass der Rücksputtereffekt einen hohen Einfluss auf die mechanischen, elektrischen und mikrostrukturellen Eigenschaften von WTi und WTiN besitzt.
6. Der Rücksputtereffekt kann mit den Parametern Sputterdruck, Bias-Leistung und Wahl des Sputtergases beeinflusst werden.
7. Die Anzahl und die Energie der rückgestreuten Edelgasatome wird durch die Wahl des Edelgases festgelegt und ist abhängig von der Atommassendifferenz zwischen Edelgas und W und Ti im Target
8. Je niedriger der Sputterdruck gewählt wird, desto höher ist die Rücksputterrate, da die Kollision von Ar mit Teilchen in der Transportphase verringert wird. Bei Erhöhung des Sputterdrucks steigt die Teilchendichte in der Prozesskammer und die Rücksputterrate wird verringert.
9. Der Rücksputtereffekt spiegelt sich in der Abscheidetemperatur, der Stöchiometrie, dem Schichtwiderstand, dem Schichtstress und der Mikrostruktur wieder.
10. Bei Verwendung einer additiven Bias-Leistung kann die Reaktion mit dem Substrat und der abgeschiedenen Schicht noch verstärkt werden. Sie wirkt wie eine zusätzliche Beschleunigung der reflektierten Ar-Atome und verstärkt den Rücksputtereffekt
11. Durchgeführte Temperaturlagerungstests mit anschließenden chemischen Analysen von WTi- und WTiN-Diffusionsbarrieren zeigen einen Zusammenhang aus Schichtzusammensetzung und Barrierenstabilität.
12. Ti, als ein Bestandteil der Diffusionsbarriere, zeigt eine Affinität zu der aufliegenden Al-Metallisierung und diffundiert ab einer Temperatur von 350 °C in die Al-Metallisierung.
13. Die hergestellten WTiN-Dünnschichten zeigen den Fehlermechanismus der Ti-Diffusion nicht und sind langzeitstabilere Al/Si-Diffusionsbarrieren.
14. In WTi-Dünnschichten bildet sich TiN, welches reaktionsträger und fest im WTiN gebunden ist.
15. Die Abscheidung der WTi- und WTiN-Barrierenschichten ist aufgrund des Rücksputtereffekts sehr gleichmäßig, sodass die messbaren Schichtdickenschwankungen an Topographien keine potentiellen Schwachstellen in der Diffusionsbarriere darstellen.
16. Die gemeinsame Strukturierung der Barrierenschicht mit dem Metall ist zu bevorzugen, sodass keine Oxidation an der Grenzfläche stattfindet und elektrische Übergangswiderstände entstehen können.

17. WTi besitzt im Vergleich zu einer standardmäßig angewendeten AlSiCu-Metallisierung einen höheren Kontaktwiderstand auf p-dotierten Si-Kontakten und einen niedrigeren Kontaktwiderstand auf n-dotierten Si-Kontakten.
18. Der verbesserte Kontakt auf n-dotierten Si wirkt sich positiv auf die statisch-elektrischen Parameter eines IGBTs aus.
19. Bei den Bondbarkeitstests mit harten AlMg_{0,5}-Draht zeigen die WTi- und WTiN_{0,2}-Diffusionsbarriere eine verbesserte Ausbeute gegenüber der AlSiCu-Metallisierung.
20. Die Anwendung der stickstoffreichsten WTi_{0,33}-Diffusionsbarriere ist bezüglich der Barrierenwirkung zu bevorzugen, zeigt aber in der Bondbarkeit mit AlMg_{0,5}-Draht eine verschlechterte Ausbeute gegenüber der AlSiCu-Metallisierung.
21. Eine Empfehlung kann aufgrund der sehr guten Barriereigenschaften und der verbesserten Bondausbeute gegenüber AlSiCu-Metallisierungen für die WTiN_{0,2}-Diffusionsbarriere in Verbindung mit einer AlCu-Metallisierung ausgesprochen werden.
22. Mit Hilfe der konformen Abscheidung von WTi und WTiN und der Verwendung einer AlCu-Metallisierung, die ohne Leistungsreduzierung abgeschieden werden kann, können auch vertiefte Gräben auf Leistungshalbleitern verfüllt werden.
23. In Anbetracht der Diffusionsstabilität und des elektrischen Verhaltens ist Ta für eine Anwendung auf Leistungshalbleitern geeignet und bietet Potential für weiterführende Untersuchungen.
24. Durch die Verwendung von N₂ bei der reaktiven Abscheidung von WTiN erhöhen sich die Parameter Schichtstress, Schichtwiderstand und Ti-Gehalt deutlich. Während der Abscheidung bildet sich ein Mischkristall aus WN und TiN aus.
25. Die Integration einer Diffusionsbarriere führt zu einer Veränderung des elektrischen Verhaltens eines Leistungshalbleiters, da der Metall-Halbleiter-Kontakt über WTi/WTiN hergestellt wird.
26. Neben der Verwendung von härteren Bonddrähten kann der Einsatz einer Barrierendünnschicht eine höhere Effizienz sowohl in der Chipherstellung als auch im Modulverbau erzielen.
27. Im Fall des WTi erscheint es fast paradox, dass der Ausfallmechanismus der Diffusionsbarriere die Diffusion einer ihrer Bestandteile selbst ist.
28. Ta und TaN besitzt eine Barrierenwirkung gegenüber Diffusion von Al und Si bis zu einer Dauer von 24 h bei 400 °C Temperaturbelastung, welches bisher nur mit einer WTiN-Barriere und einem N₂-Partialfluss von 0,33 erzielt werden konnte.

