

Pressemitteilung, 14. August 2020

## **Auf den Spuren schädlicher Metalle bei der Herstellung von Siliziumkristallen**

Im Verbundprojekt SYNERGIE untersuchten Forscher des Fraunhofer IISB in Erlangen, wie metallische Verunreinigungen in den Siliziumkristall bei dessen Herstellung eingetragen werden. Ein speziell entwickelter Versuchsaufbau ermöglichte dabei zielgerichtete Experimente mit verschiedenen Metallspezies. Im Zusammenspiel mit einem neu implementierten numerischen Simulationsmodell ließen sich die Hauptverunreinigungen und deren Quellen identifizieren. Ebenso ergaben sich neue Erkenntnisse über die Mechanismen, wie die verschiedenen Metallatome während des Herstellungsprozesses in den Kristall eindringen. Die Ergebnisse aus dem Projekt SYNERGIE erlauben direkte Vorhersagen, inwieweit sich die Reinheit der in der Produktion eingesetzten Hilfsstoffe Schmelztiegel, Tiegelbeschichtung und Silizium-Rohstoff auf die elektrische Qualität der Silizium-Wafer auswirkt.



*Herstellung einer Sprühbeschichtung auf einem G1-Tiegel am Fraunhofer IISB im Rahmen des SYNERGIE Projektes. Bild: Kurt Fuchs / Fraunhofer IISB*

Siliziumkristalle sind ein wichtiges Grundmaterial für die massenhafte Produktion preisgünstiger Solarzellen. Für die Herstellung der Kristalle wird zunächst Rohsilizium in einem Quarzguttiegel geschmolzen und anschließend kontrolliert abgekühlt. Bei der folgenden Erstarrung der Schmelze bildet sich ein Siliziumkristall mit definierten elektrischen

Eigenschaften. Der Quarzguttiegel ist auf der Innenseite mit Siliziumnitrid beschichtet. Diese Beschichtung, basierend auf hochreinem Siliziumnitridpulver (Silzot® SQ), dient unter anderem als Trennschicht und verhindert ein Anhaften des Siliziums am Quarzguttiegel, was beim Erstarren zu Rissen im Siliziumkristall führen würde.

Bei der Produktion der Siliziumkristalle ist das System aus Quarzguttiegel und Beschichtung die größte Quelle für unerwünschte metallische Verunreinigungen. Während der Kristallisation werden kontinuierlich Metallatome in das flüssige und feste Silizium eingetragen. Im Siliziumkristall lagern sie sich an Fehlern an und verschlechtern die Qualität des Kristallmaterials. So sinkt beispielsweise bei den später daraus hergestellten Solarzellen die Stromausbeute und damit der Wirkungsgrad. Die Randbereiche der Siliziumkristalle können sogar derart stark kontaminiert sein, dass diese abgeschnitten werden müssen und sich nicht weiterverwerten lassen.

Um nun genauer zu spezifizieren, welche Metalle ausgehend von welcher Quelle in welcher Konzentration in den Siliziumkristall vorliegen, entwickelten die Wissenschaftler am Fraunhofer IISB eine spezielle Versuchsanordnung. Hierbei werden Siliziumwürfel auf eine Unterlage aus verschiedenen Tiegel- und Beschichtungsmaterialien gestellt und gezielt für eine bestimmte Zeit einer hohen Temperatur ausgesetzt. Die Temperatur liegt dabei knapp unterhalb des Silizium-Schmelzpunktes von 1412°C. Eine anschließende chemische Analyse offenbart, welche Metalle bei der Prozedur in den Siliziumkristall eingedrungen sind.

Die Untersuchungen ergaben, dass bei weitem nicht alle Metalle, die in den Unterlagen in hohen Konzentrationen vorkommen, auch später im Siliziumkristall nachweisbar sind. Mit Eisen, Chrom und Cobalt konnten diejenigen Metalle identifiziert werden, die im Siliziumkristall in ausreichend hoher Konzentration vorliegen und somit hauptverantwortlich für den Performance-Verlust von zum Beispiel Solarzellen sind.

Parallel zu den experimentellen Untersuchungen wurde am Fraunhofer IISB ein numerisches Simulationsmodell für die Berechnung der Verteilung der Fremdmetalle im Siliziumkristall entwickelt. Das Modell berücksichtigt den Kontaminationsgrad von Tiegel, Siliziumnitrid-Beschichtung und Silizium-Rohstoff sowie die relevanten Parameter für die Prozessführung. Die Resultate zeigen deutlich, dass eine erhöhte Reinheit aller Hilfsstoffe die Metallkontamination in den Silizium-Kristallen signifikant reduziert, was Kristallqualität und Ausbeute enorm steigern würde. Allerdings stehen vor allem die Quarzguttiegel nicht in beliebiger Qualität zur Verfügung. Ein für die industrielle Produktion praktikabler Weg wären Barrierschichten zwischen Tiegel und Siliziumnitrid-Beschichtung, welche den Austrag von Metallen aus dem Tiegel blockieren.

Die Arbeiten aus dem SYNERGIE-Projekt bieten für industrielle Hersteller von Halbleitermaterialien eine gute Hilfestellung, um zu beurteilen, welche Materialqualität aus dem Einsatz bestimmter Hilfsstoffqualitäten resultiert und worauf sie den Fokus legen müssen, um möglichst effektiv und kostengünstig Verbesserungen zu erzielen. Die neu gewonnenen Erkenntnisse sind dabei generell auf Herstellungsprozesse für Halbleitermaterialien, bei denen Schmelztiegel zum Einsatz kommen, anwendbar.

Das Verbundprojekt SYNERGIE – „Synergetische Weiterentwicklung von Zulieferprodukten zur Reduktion der Herstellungskosten und Steigerung der Materialqualität von kristallinen Siliziumblöcken in der Photovoltaik“ – wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) gefördert. Projektpartner des Fraunhofer IISB waren die Unternehmen AlzChem Group AG und Wacker Chemie AG.

### **Ansprechpartner**

Christian Reimann

Fraunhofer IISB, Schottkystraße 10, 91058 Erlangen

Tel. +49 9131 761-272 | Fax +49 9131 761-280

christian.reimann@iisb.fraunhofer.de | www.iisb.fraunhofer.de

### **Fraunhofer IISB**

*Das 1985 gegründete Fraunhofer-Institut für Integrierte Systeme und Bauelementetechnologie IISB betreibt entsprechend des Fraunhofer-Modells angewandte Forschung und Entwicklung in den Geschäftsbereichen Leistungs- und Energieelektronik und Halbleiter. Dabei deckt das Institut in umfassender Weise die Wertschöpfungskette für komplexe Elektroniksysteme ab, vom Grundmaterial zum vollständigen Elektronik- und Energiesystem. Schwerpunkte liegen in den Anwendungsgebieten Elektromobilität und Energieversorgung.*

*Das Institut erarbeitet für seine Auftraggeber Lösungen auf den Feldern Materialentwicklung, Halbleitertechnologie und -fertigung, elektronische Bauelemente und Module, Aufbau- und Verbindungstechnik, Simulation, Zuverlässigkeit, bis hin zur Systementwicklung in der Fahrzeugelektronik, Energieelektronik und Energieinfrastruktur. Das IISB verfügt u.a. über umfangreiche Halbleiterprozesstechnik, ein Testzentrum für Elektrofahrzeuge und ein Anwendungszentrum für Gleichstromtechnik.*

*Der Hauptstandort des Fraunhofer IISB ist in Erlangen, daneben gibt es Standorte am Energie Campus Nürnberg (EnCN) sowie in Freiberg.*

### **AlzChem Group AG**

*Die AlzChem-Gruppe ist ein vertikal integrierter Hersteller von diversen Chemieprodukten, die auf der NCN-Kette basieren. Dabei handelt es sich um Produkte mit typischer Stickstoff-Kohlenstoff-Stickstoff-Bindung, die in einer Vielzahl von Branchen Anwendung finden.*

*Die Gruppe hat eine führende Marktposition in ausgewählten Nischenmärkten. Der strategische Wachstumsfokus und der Schwerpunkt der umfangreichen Forschung und Entwicklung liegen auf dem Geschäftssegment Specialty Chemicals.*

*Das Unternehmen hat rund 1.620 Mitarbeiter an vier Standorten in Deutschland und drei weiteren im Ausland.*