

# 晶片直接键合所需表面粗糙度条件<sup>\*</sup>

马子文 汤自荣<sup>†</sup> 廖广兰 史铁林

(华中科技大学机械科学与工程学院, 武汉光电国家实验室, 武汉 430074)

**摘要:** 根据 JKR 接触理论, 推导出晶片直接键合时晶片接触表面粗糙度需要满足的条件, 其中晶片接触表面粗糙度的描述是基于缝隙长度和缝隙高度的正弦波模型. 分析结果表明, 晶片直接键合的条件与无量纲参数  $\alpha$  有关. 以硅片键合为例, 根据参数  $\alpha$  可以把硅片键合分为三种类型: 硅片直接键合 ( $\alpha > 1.065$ ); 在外压力作用下键合 ( $0.57 < \alpha < 1.065$ ) 和有空洞产生的键合 ( $\alpha < 0.57$ ). 实验数据与理论结果吻合得很好.

**关键词:** 直接键合; 微观粗糙度; JKR 接触理论

**EEACC:** 2520C; 2530B

**中图分类号:** TN304.1<sup>+</sup>2

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2007)03-0465-05

## 1 引言

晶片室温直接键合主要得益于晶片表面的短程分子力和原子作用力, 如氢键和范德华力<sup>[1]</sup>. 因此晶片的表面形貌是影响直接键合的重要因素之一. 表面形貌一般分为三个范畴: 宏观几何偏差(波距大于 10mm)、表面波度(波距约为 1~10mm)、表面粗糙度(波距小于 1mm)<sup>[2]</sup>. 由于晶片表面相当平整, 因此影响晶片直接键合的表面形貌主要是表面波度和表面粗糙度. 过大的波度和粗糙度将使晶片无法键合或键合后产生空洞<sup>[3]</sup>. 只有当表面波度和粗糙度满足一定条件时, 晶片才能完全键合.

许多文献已经对室温键合晶片的表面波度、粗糙度及其接触机理进行了研究, Stengl 等人<sup>[4]</sup> 首先建立了晶片表面缝隙闭合的理论模型. Tong 和 Gösele 等人<sup>[5]</sup> 利用弹性薄板理论对这个模型做了进一步的发展. Yu 等人<sup>[6]</sup> 通过建立三维弹性场得到了室温下缝隙闭合的条件, 国内韩伟华等人<sup>[7]</sup> 根据薄板弹性力学, 给出了接触硅片表面缝隙闭合条件的推导过程. 但他们都没有考虑自发键合现象. Gui 等人<sup>[8]</sup> 在模型中假设表面起伏服从高斯分布, 并根据 DMT(Deryagin, Muller, and Toporov)<sup>[9]</sup> 接触理论推导出晶片发生室温键合所需的表面粗糙度条件, 但没有从理论上解释晶片自发键合现象.

晶片自发键合是指在不需要外力的作用下, 键合面积能够自发扩散到整个晶片的现象. 在亲水性硅片键合中, 如果表面粗糙度如粗糙度均方根值

(RMS) 小于 0.5nm, 硅片将通过氢键和范德华力直接键合<sup>[10]</sup>, 因此表面粗糙度是影响晶片直接键合的关键因素. 晶片键合的实质是两物体的接触变形. 目前考虑了接触物体之间吸附力的理论模型主要有 DMT 模型和 JKR (Johnson-Kendall-Roberts)<sup>[11]</sup> 模型, 其中 JKR 模型主要应用于表面能比较大的情况<sup>[12]</sup>. 由于表面粗糙度属于微观范畴, 在这个尺度上两接触物体之间的吸附力将起主导作用, 为此本文将从 JKR 接触理论出发, 建立晶片直接键合的理论模型, 分析晶片发生直接键合的条件, 并从实验数据进行验证.

## 2 理论模型

假设晶片表面缝隙的尺寸足够小, 表面的小突起平铺在无限宽的半平面上. 根据 Greenwood<sup>[13]</sup> 的结论, 两表面都有微起伏的模型与假设其中一表面水平另一表面有微起伏的模型效果是一致的. 为此我们假设下晶片平面为完全水平, 并以此水平线为  $x$  轴. 模型的简图如图 1 所示.

假设上晶片平面的微观表面形貌由以下函数表示:

$$f(x) = h \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right),$$

$$x \in (kL - a, kL + a), k \text{ 为整数} \quad (1)$$

其中  $a$  为晶片接触区半径;  $L$  为缝隙长度;  $h$  为缝隙的高度. 两晶片接触区域须满足条件  $2a < L$ , 根据 JKR 接触理论可推导出接触区内的压力分布为:

<sup>\*</sup> 国家重点基础研究发展规划(批准号:2003CB716207)和国家自然科学基金(批准号:50405033)资助项目

<sup>†</sup> 通信作者. Email: zirong@mail.hust.edu.cn

2006-07-18 收到, 2006-11-13 定稿

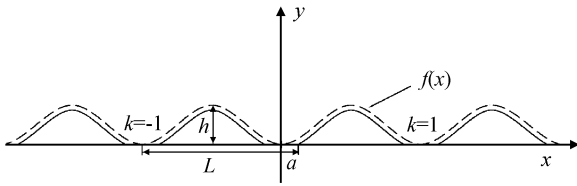


图1 晶片微观表面形貌简图 虚线表示键合前表面形貌,实线表示键合后表面形貌.

Fig.1 Schematic of micro-topography of the surfaces Geometry of the surfaces before bonding is shown by dashed line; Geometry of the surfaces after bonding is shown by solid line.

$$p(x) = \frac{\cos\left(\frac{\pi x}{L}\right)}{\sqrt{\sin^2(\pi a/L) - \sin^2(\pi x/L)}} \times \left\{ \frac{E^* h \pi}{2L} [\sin^2(\pi a/L) - 2\sin^2(\pi x/L)] + \frac{F}{L} \right\},$$

$$x \in (kL - a, kL + a) \quad (2)$$

式中  $E^* = \left( \frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right)^{-1}$  是弹性模量;  $E_i$  和  $\nu_i$  分别是不同晶片的杨氏模量和泊松比;  $F$  为晶片表面单个缝隙所受的外压力. 根据上式, 在接触区边缘压力是关于  $L$  的周期函数, 且与接触边线长度的平方根成反比, 即在  $k=0$  的情况下有:

$$p(x \rightarrow a^-) \sim \frac{K_1}{\sqrt{2\pi(a-x)}} \quad (3)$$

$K_1$  为应力强度因子. 由(2), (3)式可得:

$$K_1 = \sqrt{L \cot\left(\frac{\pi a}{L}\right) \left[ \frac{E^* h \pi}{2L} \sin^2\left(\frac{\pi a}{L}\right) - \frac{F}{L} \right]} \quad (4)$$

如果不考虑晶片接触表面之间的表面力作用, 则满足赫兹接触理论, 此时应力强度因子  $K_1=0$ , 所以根据上式有:

$$\frac{E^* h \pi}{2L} \sin^2\left(\frac{\pi a}{L}\right) = \frac{F}{L} \quad (5)$$

即赫兹接触压力为:

$$F = \frac{E^* h \pi}{2} \sin^2\left(\frac{\pi a}{L}\right) \quad (6)$$

假设两物体完全接触, 此时  $2a \rightarrow L$ , 可得到赫兹接触压力的极限值,

$$F_{\text{lim}} = E^* h \pi / 2 \quad (7)$$

如果考虑晶片接触表面之间表面力的影响, 则符合JKR接触理论. 根据该接触理论, 接触区的大小  $2a$  由接触区外的缝隙形变能释放率  $\zeta$  及表面能  $W$  的关系式  $\zeta = W$  决定. 由于假设表面力只作用在接触区边缘处, 所以能量积累率  $\zeta$  可表示为:

$$\zeta = \frac{K_1^2}{2E^*} \quad (8)$$

则根据(4)式,  $\zeta$  可重写为:

$$\zeta = \left( \frac{E^* h \pi}{2L} \sin^2\left(\frac{\pi a}{L}\right) - \frac{F}{L} \right)^2 \frac{L \cot(\pi a/L)}{2E^*} \quad (9)$$

接触区长度  $2a$  与压力  $F$  的关系可由条件  $\zeta = W$  得到:

$$F = \frac{E^* h \pi}{2} \sin^2\left(\frac{\pi a}{L}\right) - \sqrt{2E^* W L \tan(\pi a/L)} \quad (10)$$

当接触区很小, 即  $a/L \ll 1$  时, 缝隙间的影响可忽略不计. 此时上式可写为:

$$F = \frac{E^* h a^2 \pi^3}{2L^2} - \sqrt{2E^* W \pi a} \quad (11)$$

当未接触区变短, 即  $a/L \rightarrow 1/2$  时,  $\cot(\pi a/L) \rightarrow 0$ , 此时能量释放率趋于零. 在这种极限情况下, 为了满足条件  $\zeta = W$  必须有非常大的外压力 ( $F < 0$ ). 这说明此时未接触区的两表面很不稳定, 很容易变为接触状态.

为了探讨接触表面的稳定性问题, 我们对变量进行正规化:

$$\hat{F} = \frac{F}{F_{\text{lim}}} = \sin^2(\pi c) - \alpha \sqrt{\tan(\pi c)} \quad (12)$$

其中  $F_{\text{lim}}$  由(7)式定义;  $c = a/L$ ;  $\alpha$  为无量纲参数, 其表达式为:

$$\alpha = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \times \frac{\sqrt{L}}{h} \sqrt{\frac{W}{E^*}} \quad (13)$$

根据(12)式, 可以看到等式右边第一项为正规化的赫兹压力  $\hat{F}_{\text{hz}}$ , 所以(12)式可写为:

$$\hat{F} = \hat{F}_{\text{hz}} - \alpha \sqrt{\tan(\pi c)} \quad (14)$$

其中  $\hat{F}_{\text{hz}} = \sin^2(\pi c)$ , 与赫兹压力比较可知, 等式右边的第二项显示了表面力对接触区的影响.

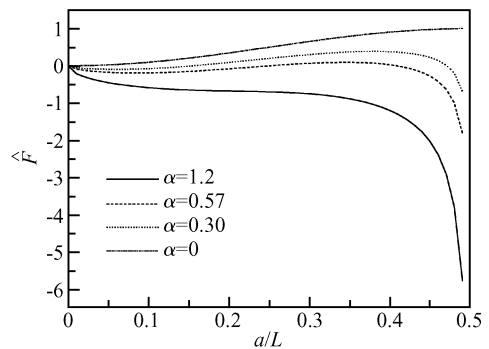


图2 正规化的接触压力  $\hat{F}$  与正规化的接触长度  $c$  在不同的  $\alpha$  值情况下的关系曲线

Fig.2 Dependence of the normalized contact zone  $c$  versus the normalized contact force  $\hat{F}$  for different values of  $\alpha$

图2显示了正规化的压力  $\hat{F}$  与正规化的接触区长度  $c$  在不同  $\alpha$  值情况下的函数关系.  $\alpha = 0$  时, 对

应的是没有考虑表面力作用下的赫兹接触,此时  $\dot{F}$  为正值并随  $c$  值的增大而增大,这说明不考虑表面力作用时,要使两晶片能够键合必须施加一定的外压力.当  $\alpha$  比较小且  $c$  在较小区间内时,  $\dot{F}$  为负值,在  $c = c_1$  处  $\dot{F}$  达到最小值.随着  $c$  的增大  $\dot{F}$  变为正值,在  $c = c_2$  处  $\dot{F}$  达到正的最大值.在  $c_2 < c < 0.5$  的区间内,  $\dot{F}$  迅速减小并趋向负无穷.当接触长度在  $0 < c < c_1$  及  $c_2 < c < 0.5$  时,  $\dot{F}$  为负值,说明在此区域两晶片的表面将由于表面力的作用自发接触.随着  $\alpha$  的增大  $\dot{F}$  的最大值不断减小直到为负值,即存在当  $\alpha \geq \alpha^*$  时,  $\dot{F}_{\max} \leq 0$ . 在此种情况下,由于  $\dot{F} < 0$ , 不需施加外压力两晶片也能自发接触.  $\alpha^*$  通过计算可得到:

$$\alpha^* = 3^{\frac{3}{7}}/4 \approx 0.57$$

然而  $\alpha \geq \alpha^*$  并不能保证两晶片接触后其接触面积能不断扩大,为此要使两晶片能够自发完全键合,则需要满足条件:对所有  $0 \leq c \leq 0.5$ ,  $d\dot{F}/dc \leq 0$ . 此时两晶片从自发接触开始,随着晶片表面的变形,其所受的表面力呈单调递增趋势,接触面积也会不断扩大至最终完全键合.在此条件下有  $\alpha \geq \alpha_c$ ,  $\alpha_c$  通过计算可得到:

$$\alpha_c = \frac{15}{16} \left( \frac{5}{3} \right)^{\frac{1}{4}} \approx 1.065$$

因此要使晶片能够完全键合,则  $\alpha$  必须足够大.从(13)式可知有多种方法来增大  $\alpha$ ,如增大晶片的表面能  $W$  或提供表面粗糙度更小的晶片.根据晶片自发键合必须满足的条件  $\alpha_c = 1.065$  可以得到缝隙高度与长度的关系式如下:

$$h = \frac{1}{1.065} \times \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \left( \frac{WL}{E^*} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (15)$$

### 3 结果与讨论

以硅片亲水性直接键合为例<sup>[8]</sup>,取硅片的表面能  $W = 0.1\text{J/m}^2$ ,杨氏模量  $E = 160\text{GPa}$ ,泊松比  $\nu = 0.28$ ,从而可以得到硅片的弹性模量  $E^* = 70.53\text{GPa}$ .根据(13)式,当  $\alpha = 0.57$  及  $\alpha = 1.065$  时,

可得到硅片键合中硅片表面缝隙高度与长度的关系曲线如图 3 所示:

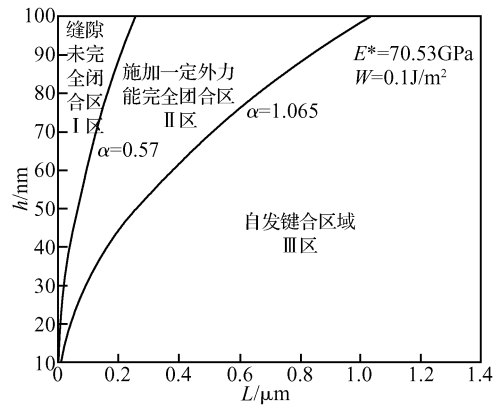


图 3 不同  $\alpha$  值情况下,硅片表面缝隙高度  $h$  与缝隙长度  $L$  之间的关系

Fig.3 Parameter combinations of gap height  $h$  and gap length  $L$  of silicon wafers for different values of  $\alpha$

如图 3 所示,当缝隙高度小于缝隙直接键合所允许的最大高度时,晶片将受表面力的作用而完全直接键合,即图中所示 III 区.当缝隙高度大于缝隙完全闭合所允许的最大高度时,即图中所示 I 区,晶片键合时将有空洞产生.图示中间过渡区则为需施加一定外压力缝隙才能完全闭合的区域.

为了验证该理论的合理性,选取 Gui 等人<sup>[8]</sup>的实验数据进行分析.在 Gui 的实验中一共有 5 个硅片键合对,每个键合对的表面粗糙度不一样.由于实际的硅片表面形貌是随机分布的,而本理论模型基于假设晶片表面形貌服从正弦分布,所以 Gui 的实验数据不能在本理论公式中直接运用.为此,需要对实验数据进行一定的处理.表征表面粗糙度特性的参数主要有  $\sigma$  和  $R$ ,  $\sigma$  为硅片表面微小缝隙的最高点和最低点离平均高度的远近程度,  $R$  为表面微小凸起的半径.所以可以用标准方差  $\sigma$  来代替缝隙的高度  $h$ .为了保守计算缝隙的长度(取较小的缝隙长度),根据 JKR 接触理论<sup>[11]</sup>,缝隙长度可用关系式  $L = 2\sqrt{3Rh}$  得到.经过以上的数据处理,硅片表面粗糙度特性及计算所得的  $\alpha$  值如表 1 所示.

表 1 硅片室温直接键合结果

Table 1 Results of direct silicon wafer bonding at room temperature

硅片对	$L/\mu\text{m}$	$h/\text{nm}$	Gui 的实验结果 <sup>[8]</sup>	$\alpha$	理论结果
1	0.301~0.472	1.2	外压力,速度慢	0.49~0.614	I, II 区
2	0.329~0.493	1.1	外压力,速度慢	0.559~0.684	I, II 区
3	0.125~0.166	1.0	无法键合	0.379~0.437	I 区
4	0.114~0.174	0.9	无法键合	0.402~0.497	I 区
5	0.20~0.378	<0.1	直接键合	4.794~6.59	III 区

Gui 的实验表明,硅片对 1 和硅片对 2 键合时比较困难且键合速度慢,需要借助一定的外压力,键合后的界面用红外检测发现有空洞存在;硅片对 3 和硅片对 4 无法键合,硅片对 5 不需任何外压力就能直接键合.以上实验现象与我们的理论计算值吻合得很好.对于硅片对 1 和硅片对 2,由于  $\alpha$  值处在 0.57 附近,所以其粗糙度特性值同时处在 I 区和 II 区,按照理论分析结果,硅片表面的一部分将能在外压力作用下键合,而表面另一部分则不能键合从而产生空洞.对于硅片对 3 和硅片对 4,由于  $\alpha$  值小于 0.57,所以其粗糙度特性值全部处于 I 区,硅片对即使在外压力的作用下也无法键合.对于硅片对 5,由于其  $\alpha$  值大于 1.065,所以其粗糙度特性值全部处于 III 区,硅片对不需任何外压力即能自发键合.

## 4 结 论

由 JKR 接触理论出发,推导出晶片直接键合需要满足的条件.从理论结果可以看出提高晶片的键合能力有两种方法:增大晶片表面能或减小晶片的表面粗糙度.根据理论结果可以把晶片表面粗糙度特性值分为三个区:当晶片表面粗糙度特性值在 I 区( $\alpha < 0.57$ )时,晶片将不能完全键合;当晶片表面粗糙度特性值在 II 区( $0.57 < \alpha < 1.065$ )时,晶片在外压力的作用下能完全键合;当晶片表面粗糙度特性值在 III 区( $\alpha > 1.065$ )时,晶片不需要外界压力就能自发键合.理论结果与实验结果吻合得很好.该理论可为晶片的直接键合提供理论依据,也可为晶片键合工艺的参数优化提供参考.

## 参 考 文 献

- [1] Tong Q Y, Gösele U. Semiconductor wafer bonding: recent developments. *Materials Chemistry and Physics*, 1994, 37 (22):101
- [2] Chen Longde, Zhao Fuling. Basic technology of exchangeability measurement (revised edition). Dalian: Dalian University of Technology Press, 1997 (in Chinese) [陈隆德, 赵福令. 互换性与测量技术基础 (修订版). 大连: 大连理工大学出版社, 1997]
- [3] Gösele U, Stenzel H, Martini T, et al. Self-propagating room-temperature silicon wafer bonding in ultrahigh vacuum. *Appl Phys Lett*, 1995, 67(24):3614
- [4] Stengl R, Mitani K, Lehman V, et al. A model for the silicon wafer bonding process. *Proceedings of the IEEE SOS/SOI Technology Conference*, New York, 1989:123
- [5] Tong Q Y, Gösele U. Thickness considerations in direct silicon wafer bonding. *J Electrochem Soc*, 1995, 142(11):3975
- [6] Yu H, Suo Z. A model of wafer bonding by elastic accommodation. *J Mech Phys Solids*, 1998, 46(5):829
- [7] Han Weihua, Yu Jinzhong. Criterion of gap closing for silicon wafer bondability. *Chinese Journal of Semiconductors*, 2001, 22(12):1516 (in Chinese) [韩伟华, 余金中. 硅片发生室温键合所需的平整度条件. *半导体学报*, 2001, 22 (12): 1516]
- [8] Gui C, Elwenspoek M, Tas N, et al. The effect of surface roughness on direct wafer bonding. *J Appl Phys*, 1999, 85 (10):7448
- [9] Deryagin B V, Muller V M, Toporov Y P. Effect of contact deformations on the adhesion of particles. *J Colloid Interface Sci*, 1975, 53(2):314
- [10] Plohl A, Krauter G. Wafer direct bonding: tailoring adhesion between brittle materials. *Mater Sci Eng*, 1999, R25:1
- [11] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids. *Proc Royal Soc London A*, 1971, 324(1558):301
- [12] Maugis D. Adhesion of spheres: the JKR-DMT transition using Dugdale model. *J Colloid Interface Sci*, 1992, 150 (11):243
- [13] Greenwood J A, Tripp J H. The contact of two nominally flat rough surfaces. *Proc Inst Mech Eng*, 1970/1971, 185 (48):625

[1] Tong Q Y, Gösele U. Semiconductor wafer bonding: recent

## Criterion of Microroughness for Self-Propagating Wafer Bonding\*

Ma Ziwen, Tang Zirong<sup>†</sup>, Liao Guanglan, and Shi Tielin

(Wuhan National Laboratory for Optoelectronics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

**Abstract:** The criterion of microroughness for self-propagating wafer bonding is studied according to JKR contact theory, where the microroughness model is based on a sinusoidal distribution for gap height and gap length. Our analysis shows that the criterion for self-propagating wafer bonding is relevant to the dimensionless parameter. In silicon wafer bonding, using the dimensionless parameter as a measure, three regions of silicon wafer bonding can be identified: self-propagating silicon wafer bonding ( $\alpha > 1.065$ ), external pressure assisted silicon wafer bonding ( $0.57 < \alpha < 1.065$ ), and silicon wafer bonding with voids ( $\alpha < 0.57$ ). Experimental data are in reasonable agreement with this theory.

**Key words:** self-propagating wafer bonding; microroughness; JKR contact theory

**EEACC:** 2520C; 2530B

**Article ID:** 0253-4177(2007)03-0465-05

---

\* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (No.2003CB716207) and the National Natural Science Foundation of China(No.50405033)

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: zirong@mail.hust.edu.cn

Received 18 July 2006, revised manuscript received 13 November 2006

©2007 Chinese Institute of Electronics