

# Si-Si 直接键合的杂质分布\*

陈新安<sup>1,†</sup> 黄庆安<sup>2</sup>

(1 绍兴文理学院, 绍兴 312000)

(2 东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

**摘要:** 在 Si-Si 直接键合过程中, 界面处存在一层很薄的厚度恒定的本征 SiO<sub>2</sub>. Si 对 SiO<sub>2</sub> 中的杂质的抽取效应, 导致了杂质在界面处的浓度大大降低, 根据改进了的杂质在 Si-Si 直接键合片中分布模型, 推导出了杂质分布的表达式, 在理论上和实验上都对该式进行了验证. 杂质通过 SiO<sub>2</sub> 再向 Si 中扩散的杂质总量与 Si-Si 扩散相比大大减少, 使所形成的 p<sup>-</sup> n<sup>+</sup> 结的结深减小.

**关键词:** Si-Si 直接键合; 抽取效应; 本征 SiO<sub>2</sub>

**PACC:** 3520G; 6845; 8265

**中图分类号:** TN286

**文献标识码:** A

**文章编号:** 0253-4177(2006)11-2051-05

## 1 引言

Si-Si 直接键合技术就是两片抛光的硅片经适当表面清洗与活化, 在室温下直接键合, 再经高温处理, 使界面发生物理化学反应, 增加键合强度而形成的整体, 这种技术称为 Si 片直接键合技术(SDB). 由于该工艺简单, 两键合片的晶向、电阻率、导电类型可自由选择, 且与半导体工艺完全兼容, 所以自 1985 年 Lasky 首次报道以来, 得到广泛重视与快速发展<sup>[1]</sup>. Si-Si 键合技术在功率器件方面也得到应用, 可代替传统的深扩散和厚外延工艺, 以实现高的击穿电压. 与厚外延材料相比, 由于键合经历的高温时间短, 温度相对低, 因此, 材料性能保持较好, 缺陷密度小, 击穿电压高<sup>[2]</sup>. 1986 年日本东芝公司已用 SDB 工艺制出 1800V, 10A 的 IGBT<sup>[3]</sup>. 如今, Si-Si 直接键合技术已经应用于电力电子器件的 IGBT, IGDT, IGCT, SITH, MTO, VDMOSFET<sup>[4,5]</sup>, 是 Si-Si 直接键合技术发展的一个重要方向.

然而, 过去对 Si-Si 直接键合的研究主要集中在键合工艺和它的应用方面, 对键合的杂质分布研究的不多. 键合界面处的杂质分布对器件的 pn 结的结深、pn 结的击穿电压、结电容等电学性能产生很大影响, 因此很有必要对键合界面处杂质分布情况进行深入的研究. Si-Si 直接键合的杂质分布受温度、本征 SiO<sub>2</sub> 厚度及其变化、杂质扩散系数、晶格中断等影响, 既不同于一般硅工艺中扩散的杂质分布, 也不同于外延过程中的自掺杂的杂质分布, 键合界

面杂质浓度分布显示出了台阶<sup>[6,7]</sup>. 一些研究者已经在这方面做了大量的工作, 并且给出了杂质扩散系数为常数时的杂质分布<sup>[8,9]</sup>, 但是, 这里面也存在一些问题. 本文主要根据杂质在 Si 中的扩散系数远大于杂质在 SiO<sub>2</sub> 中的扩散系数, 硅对 SiO<sub>2</sub> 中的杂质进行的抽取效应, 导致了杂质在界面处的浓度大大降低, 改进了杂质在 Si-Si 直接键合片中分布模型, 推导出了杂质分布的表达式, 在理论上和实验上都进行了验证. 并且从扩散杂质总量上可以看出由于本征 SiO<sub>2</sub> 层的存在, 杂质通过 SiO<sub>2</sub> 再向 Si 中的扩散杂质总量与 Si-Si 扩散相比大大减少, 这正是不同于其他扩散的原因.

## 2 杂质分布的推导

在键合过程中, 为了使两抛光硅片在室温下良好地贴合在一起, 先对硅片进行表面处理, 使表面生成一薄层本征 SiO<sub>2</sub> 以吸附 OH 集团, 界面上的羟基(-OH)发生聚合反应生成 SiO<sub>2</sub>, Si-OH + OH-Si → Si-O-Si + H<sub>2</sub>O. 因此键合 Si 片界面有氧化层存在. 实验证明, 氧化层厚度在 200~600℃ 范围内随温度升高而降低, 在 600~1200℃ 范围内, 厚度恒定<sup>[6]</sup>. 因此, Si-Si 直接键合的物理模型如图 1 所示, 两硅片中间存在厚度一定的本征 SiO<sub>2</sub> 层. 设两键合 Si 片初始时为均匀掺杂, 杂质浓度分别为 C<sub>0</sub>, C<sub>1</sub>, 中间本征氧化层的厚度为 d, 从左向右的三个区域 Si, SiO<sub>2</sub>, Si 用 I, II, III 区表示.

\* 国家高技术研究发展计划(批准号:2003AA404010)和国家杰出青年科学基金(批准号:50325519)资助项目

† 通信作者. Email: chenxinan02@st.lzu.edu.cn

2006-04-12 收到, 2006-06-03 定稿

2.1 一种杂质的扩散情况

先考虑一种杂质的扩散,如左侧杂质 As 向右侧的扩散.取图 2 所示的坐标系,设杂质 As 的初始浓度为  $C_0$ ,在某一位置,某一时刻的浓度为  $C(x, t)$ ,在 I, II, III 区分别用  $C_1(x, t), C_2(x, t), C_3(x, t)$  表示.

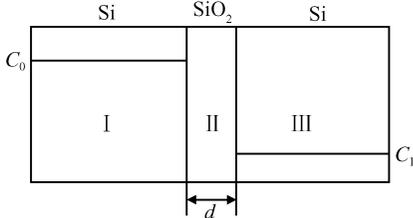


图 1 硅片直接键合模型  
Fig.1 A model of SDB

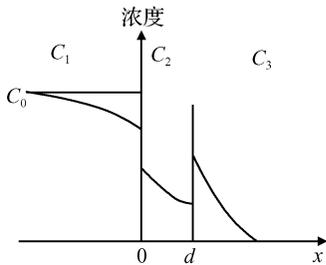


图 2 一侧杂质的扩散模型  
Fig.2 Impurity diffusion from one side

(1) 杂质从 I 区向 II 区扩散

由于 As 在 Si 和 SiO<sub>2</sub> 中固溶度不一样,定义杂质在 Si 和 SiO<sub>2</sub> 中的平衡浓度之比  $m$  为分凝系数,故从 I 区向 II 区扩散时,As 的浓度在 Si-SiO<sub>2</sub> 界面处将按分凝系数  $m$  的比例进行分配.杂质在 I, II 区的扩散方程为:

$$\frac{\partial C_1(x, t)}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 C_1(x, t)}{\partial x^2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_2(x, t)}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 C_2(x, t)}{\partial x^2} \quad (2)$$

初始条件:  $C_1(x, 0) = C_0, \quad x < 0$  (3)

$C_2(x, 0) = 0, \quad x > 0$  (4)

边界条件:  $C_2/C_1 = k = 1/m, \quad x = 0$  (5)

$$D_1 \frac{\partial C_1}{\partial x} = D_2 \frac{\partial C_2}{\partial x}, \quad x = 0 \quad (6)$$

解上面的方程得出<sup>[8]</sup>:

$$C_1(x, t) = \frac{C_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \left\{ 1 - k \sqrt{D_2/D_1} \operatorname{erf} \frac{x}{2 \sqrt{D_1 t}} \right\} \quad (7)$$

$$C_2(x, t) = \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{x}{2 \sqrt{D_2 t}} \quad (8)$$

(2) 杂质的抽取效应和向 III 区的扩散

杂质 As 在接近 SiO<sub>2</sub>-Si 界面处,浓度由方程 (8) 可以求出:

$$C_2 \Big|_{x=d} = \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{d}{2 \sqrt{D_2 t}} \quad (9)$$

由于在 1100°C 时,杂质 As 在 SiO<sub>2</sub> 中的扩散系数  $D_2 = 3.58 \times 10^{-16} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,在 Si 中的扩散系数  $D_3 = 4.26 \times 10^{-14} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,故  $D_3 \gg D_2$ ,所以杂质 As 在 Si 中扩散比在 SiO<sub>2</sub> 中扩散快得多,这就造成了 Si 对 SiO<sub>2</sub> 中的杂质 As 的抽取效应,使在界面处杂质的浓度急剧下降.相反,当  $D_3 \ll D_2$  时,扩散到界面的杂质不能有效地扩散走,这就会造成杂质在界面处的积累效应,使界面处杂质浓度升高.假设在 SiO<sub>2</sub>-Si 界面处的下降影响的范围很小,不会影响到杂质 As 在 SiO<sub>2</sub> 中的总体分布,即不会影响到 II 区的 SiO<sub>2</sub>-Si 界面处杂质的分布,也就是对各处杂质的流密度影响很小,如图 3 所示.所以在 II 区的 SiO<sub>2</sub>-Si 界面处杂质的流密度为:

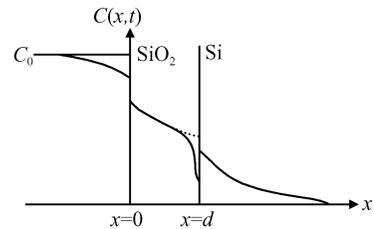


图 3 抽取效应对杂质分布的影响  
Fig.3 Impurity diffusion with extractive effect

$$J_2 \Big|_{x=d} = - D_2 \frac{\partial C_2(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=d} = \frac{\sqrt{D_2/t}}{\sqrt{\pi}} \times \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \exp\left(-\frac{d^2}{4D_2 t}\right) \quad (10)$$

在 SiO<sub>2</sub>-Si 界面处,由于抽取效应,杂质已经不再是  $C_2(d, t)$ ,而分成了  $C'_2(d, t)$  和  $C_3(d, t)$ ,仍然按照分凝系数  $m$  进行分配,即  $C_3(d, t) = mC'_2(d, t)$ .这与 Si-SiO<sub>2</sub> 界面处初始杂质浓度  $C_0$  分成  $C_1(0, t)$  和  $C_2(0, t)$  相似.可以得出:

$$C'_2(d, t) = \frac{C_2(d, t)}{1 + m \sqrt{D_3/D_2}} \quad (11)$$

$$C_3(d, t) = \frac{mC_2(d, t)}{1 + m \sqrt{D_3/D_2}} \quad (12)$$

由于  $D_3 \gg D_2$

$$C_3(d, t) \approx \frac{mC_2(d, t)}{m \sqrt{D_3/D_2}} = \frac{C_2(d, t)}{\sqrt{D_3/D_2}} = \frac{kC_0 \sqrt{D_2/D_3}}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{d}{2 \sqrt{D_2 t}} \quad (13)$$

所以杂质在 III 区的扩散方程为:

$$\frac{\partial C_3(x, t)}{\partial t} = D_3 \frac{\partial^2 C_3(x, t)}{\partial x^2} \quad (14)$$

初始条件:  $C_3|_{t=0} = 0$  (15)

边界条件:

$$C_3|_{x=d} = f(t) = \frac{kC_0 \sqrt{D_2/D_3}}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}} \quad (16)$$

由于上面的方程中,边界条件不是一个恒值,而是时间的函数  $f(t)$ ,根据数学物理方程可以得出<sup>[10]</sup>:

$$\begin{aligned} C_3(x, t) &= \frac{x-d}{2\sqrt{D_3 t}} \int_0^t f(\tau) \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x-d)^2}{4D_3(t-\tau)}} d\tau \\ &= \frac{kC_0 \sqrt{D_2/D_3}}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \left( \frac{x-d}{2\sqrt{D_3 t}} + \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}} \right) \end{aligned} \quad (17)$$

### 2.2 杂质分布的验证

#### (1) 简化模型验证

把中间的 SiO<sub>2</sub> 换成硅,就得到图 4 的简化模型.杂质的扩散系数为  $D$ ,可以得出:

$$C(x, t) = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \quad (18)$$

取  $D_1 = D_2 = D_3 = D, m = 1$ ,对方程(7),(8),(17)进行化简,在三个区域中得到一个统一的方程式:

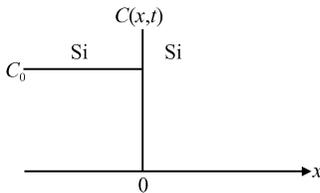


图 4 简化模型

Fig. 4 A simplified model

$$\begin{aligned} C_1(x, t) &= C_2(x, t) = C_3(x, t) \\ &= \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \end{aligned} \quad (19)$$

#### (2) 杂质流密度和总量验证

界面处进入硅中的流密度为:

$$\begin{aligned} J_3 \Big|_{x=d} &= -D_3 \frac{\partial C_3(x, t)}{\partial x} \Big|_{x=d} \\ &= \frac{\sqrt{D_2/t}}{\sqrt{\pi}} \times \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \exp\left(-\frac{d^2}{4D_2 t}\right) \end{aligned} \quad (20)$$

与方程(10)比较,二者相等,所以流过界面的流密度相等.

通过 Si-SiO<sub>2</sub> 界面进入二氧化硅和硅中的杂质总量为:

$$Q_{in} = \int_0^d C_2(x, t) dx + \int_d^\infty C_3(x, t) dx \quad (21)$$

其中:

$$\begin{aligned} \int_d^\infty C_3(x, t) dx &= \int_d^\infty \frac{kC_0 \sqrt{D_2/D_3}}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \left( \frac{x-d}{2\sqrt{D_3 t}} + \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}} \right) dx \\ &= \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \int_d^\infty \sqrt{D_2/D_3} \times \\ &\quad \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_3 t}} dx = \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \int_d^\infty \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_2 t}} dx \end{aligned} \quad (22)$$

把方程(22)代入方程(21)可以得出:

$$\begin{aligned} Q_{in} &= \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \left\{ \int_0^d \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_2 t}} dx + \int_d^\infty \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_2 t}} dx \right\} \\ &= \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \times \sqrt{D_2 t/\pi} \end{aligned} \quad (23)$$

I 区的硅中杂质减少的总量为:

$$\begin{aligned} Q_{out} &= \int_0^\infty (C_0 - C_1(x, t)) dx \\ &= \frac{kC_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \times \sqrt{D_2 t/\pi} \end{aligned} \quad (24)$$

所以杂质总量也相等.

#### (3) 实验结果验证

键合好的硅片,可以用扩展电阻法测量出杂质在界面处的分布情况,杂质的浓度与初始浓度相差 1~2 个数量级<sup>[6]</sup>,这与计算结果一致.

### 2.3 总的杂质分布

至此, I 区杂质 As 在 I, II, III 区中的浓度分布  $C_1(x, t), C_2(x, t), C_3(x, t)$  均已求出.同理,可以得到 III 区低浓度杂质在 III, II, I 区中的分布  $C_4(x, t), C_5(x, t), C_6(x, t)$ .令 I, III 区杂质的分凝系数为  $m_0, m_1, k_0 = 1/m_0, k_1 = 1/m_1$ .两种杂质分布相迭加,得 I, II, III 区净杂质浓度分布:

I 区,  $x \leq 0$ :

$$\begin{aligned} C_I &= C_1 + C_6 = \frac{C_0}{1 + k_0 \sqrt{D_2/D_1}} \times \\ &\quad \left\{ 1 - k_0 \sqrt{D_2/D_1} \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{D_1 t}} \right\} \pm \\ &\quad \frac{k_1 C_1 \sqrt{D_5/D_4}}{1 + k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{-x}{2\sqrt{D_6 t}} + \frac{d}{2\sqrt{D_5 t}} \right) \end{aligned} \quad (25)$$

II 区,  $0 \leq x \leq d$ :

$$\begin{aligned} C_{II} &= C_2 + C_5 = \frac{k_0 C_0}{1 + k_0 \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{x}{2\sqrt{D_2 t}} \pm \\ &\quad \frac{k_1 C_1}{1 + k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \operatorname{erfc} \left( \frac{d-x}{2\sqrt{D_5 t}} \right) \end{aligned} \quad (26)$$

III 区,  $x \geq d$ :

$$C_{III} = C_3 + C_4 = \frac{k_0 C_0 \sqrt{D_2/D_3}}{1 + k_0 \sqrt{D_2/D_1}} \times \operatorname{erfc}\left(\frac{x-d}{2\sqrt{D_3 t}} + \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}}\right) \pm \left\{ C_1 + \frac{C_1}{1 + k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \operatorname{erfc} \frac{d-x}{2\sqrt{D_4 t}} \right\} \quad (27)$$

2.4 杂质分布的计算模拟

在 Si-Si 直接键合的过程中,由于中间本征氧化层的存在,对杂质的扩散产生了很大影响.当杂质由 Si 中进入 SiO<sub>2</sub> 时,由于杂质 SiO<sub>2</sub> 中的扩散系数远小于 Si 中的扩散系数,阻止了杂质的扩散;当杂质由 SiO<sub>2</sub> 中进入 Si 时,Si 对 SiO<sub>2</sub> 中杂质的抽取效应降低了界面处 SiO<sub>2</sub> 和 Si 中的杂质浓度.通过本征氧化层扩散到硅中的杂质总量比没有本征氧化层时小很多,同样,初始硅中的杂质总量减少也小.为了清楚直观地说明 SiO<sub>2</sub> 和抽取效应对杂质分布的影响,对 Si-Si 直接键合的 pn 结的杂质分布进行了计算和模拟.掺杂 As 的 n 型硅片的杂质浓度为 1 × 10<sup>19</sup> cm<sup>-3</sup>,分凝系数为 10;掺杂 B 的 p 型硅片的杂质浓度为 1 × 10<sup>14</sup> cm<sup>-3</sup>,分凝系数为 0.3;键合温度为 1100°C,时间为 1.5h.图 5 和图 6 分别给出了 As 和由 As 与 B 形成的 pn 结的杂质分布.从图中可以看出中间氧化层对杂质分布有很大影响,与没有中间氧化层的杂质浓度相比较,在键合界面处杂质浓度要低 1~2 个数量级,进入硅中的杂质总量很少.图 7 给出了一种杂质的在氧化层两边硅中减少的浓度和增加的浓度的分布量.从图中可以看出,杂质的减少量和杂质的增加量基本相等.另外,给出了相同模拟条件下不考虑抽取效应时杂质的分布,如图 8 所示.从图中可以看出,从 SiO<sub>2</sub> 扩散到 Si 中的杂质浓度比没有中间 SiO<sub>2</sub> 的条件下还多,显然与实际情况不符合,从杂质总量上考虑,也与实际情况相反.

所以杂质在不同材料中扩散,由于杂质的扩散系数差别很大,会在两种材料的界面存在着抽取或积累等其他效应,而不仅仅是杂质的分凝系数所能够解释的.

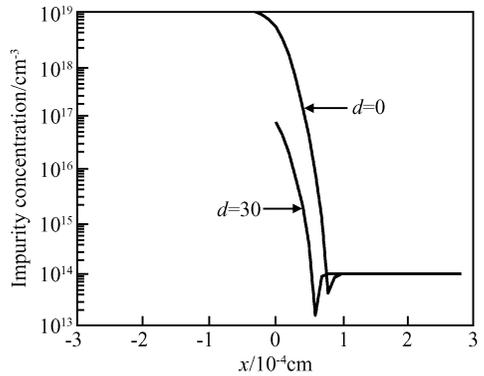


图 6 键合 pn 结净杂质分布

Fig.6 Net impurity distribution for the bonding pn junction

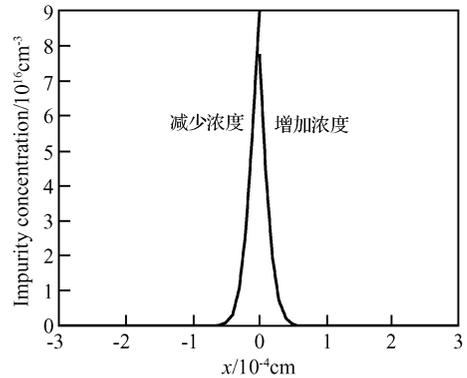


图 7 杂质减少和增加浓度的分布

Fig.7 Comparison of decrease with increase in the both sides

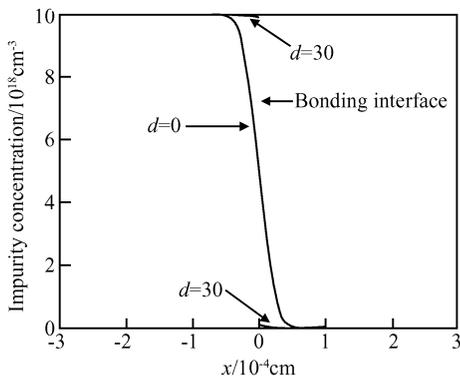


图 5 杂质 As 的浓度分布

Fig.5 Concentration profile of As

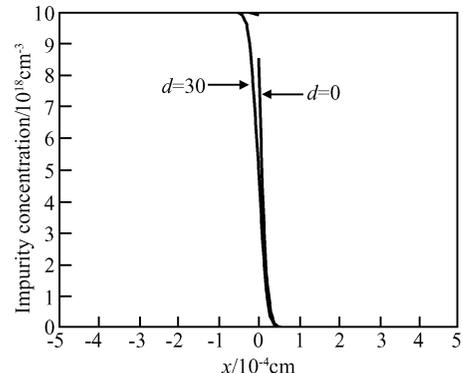


图 8 未考虑抽取效应的杂质分布

Fig.8 Impurity distribution without extractive effect

### 3 结论

在 Si-Si 直接键合的过程中,由于中间本征氧化层的存在,对杂质的扩散产生了很大影响.通过本征氧化层扩散到硅中的杂质总量比没有本征氧化层时小很多,同样,初始硅中的杂质总量减少也小.本文考虑到杂质在不同材料中扩散系数的不同而引起的在材料界面处的抽取或积累效应,给出了杂质的分布模型、解析方程和模拟结果,与实际的实验结果更加接近.

#### 参考文献

- [1] Lasky J B, et al. Silicon-on-insulator by bonding and etch back. Proc Int Electron Device Meeting, USA, 684-687, 1985:684
- [2] Wiget R, Pécz B, Burte E P. Silicon direct bonding(SDB)-a substrate material for electronic devices. IEEE Proc 1995 Int Conf on Power Electronics and Drive Systems (Singapore), 1995:75
- [3] Nakagawa A, Watanabe K, Yamaguchi Y, et al. 1800V bipolar-mode MOSFETs; a first application of silicon wafer direct bonding (SDB) technique to a power device. Technical Digest of the International Electronic Device Meeting, 1986: 122
- [4] Wang Cailin, Gao Yong, Zhang Xin. Application of silicon direct bonding technique in new power electronic device. Chinese Journal Electron Devices. 2005, 28(4):95 (in Chinese)[王彩琳,高勇,张新.硅直接键合(SDB)技术在新型电力电子器件应用中的新进展.电子器件,2005,28(4):945]
- [5] Yang Qingling, Feng Jian. Silicon direct bonding technology for VDMOSFET's. Microelectronics, 2004, 34(2): 215 (in Chinese)[羊庆玲,冯建.适合于VDMOSFET的硅片直接键合技术.微电子学,2004,34(2):215]
- [6] Huang Qing'an. Silicon micromachining technology. Beijing, Science Press, 1996(in Chinese)[黄庆安.硅微机械加工技术.北京:科学出版社,1996]
- [7] Chen Junning, Huang Qing'an, Zhang Huizhen, et al. Impurities at Si/Si direct bonding interface. Research & Progress of SSE, 1993, 13(1): 35 (in Chinese)[陈军宁,黄庆安,张会珍,等.硅/硅直接键合界面杂质.固体电子学研究进展, 1993,13(1):35]
- [8] Shao Nan. The density distribution of the foreign matter spreaded a layer of Si through a layer of SiO<sub>2</sub>. Journal of Yunnan Normal University, 1996, 16(1): 7 (in Chinese)[邵楠.通过二氧化硅层扩散到硅中的杂质分布.云南师范大学学报,1996,16(1):7]
- [9] Crank J. The mathematics of diffusion. London:Oxford University Press,1957.Chap2
- [10] Zhang Peijun, Huang Qing'an. Model and simulation of impurity distribution for silicon direct bonding. Chinese Journal of Semiconductors, 2003, 24(8): 88 (in Chinese)[张佩君,黄庆安.硅片直接键合杂质分布的模型与模拟.半导体学报, 2003,24(8):88]

## Impurity Distribution of Silicon Direct Bonding\*

Chen Xin'an<sup>1,†</sup> and Huang Qing'an<sup>2</sup>

(1 Shaoxing College of Arts and Sciences, Shaoxing 312000, China)

(2 Key Laboratory of the MEMS of Ministry of Education, Southeast University, Nanjing 210096, China)

**Abstract:** There is a thin layer of native oxide between two directly bonded silicon wafers. The silicon extracts impurity from the oxide, thus drastically decreasing the impurity concentration at the interface of SiO<sub>2</sub>-Si. Based on the modified model of silicon direct bonding, an expression of impurity distribution is derived and verified by theory and experiment. Finally, it is found that the total impurity in silicon with oxide is much less than that without oxide, which decreases the junction depth of p<sup>-</sup>n<sup>+</sup> junction.

**Key words:** silicon direct bonding; extractive effect; native oxide

**PACC:** 3520G; 6845; 8265

**Article ID:** 0253-4177(2006)11-2051-05

\* Project supported by the National High Technology Research and Development Program of China(No. 2003AA404010) and the National Science Found for Distinguished Young Scholars of the National Natural Science Foundation of China (No. 50325519)

† Corresponding author. Email: chenxinan02@st.lzu.edu.cn

Received 12 April 2006, revised manuscript received 3 June 2006