

硅片直接键合杂质分布的模型与模拟^{*}

张佩君 黄庆安

(东南大学 MEMS 教育部重点实验室, 南京 210096)

摘要: 根据键合过程和半导体中杂质扩散的规律建立了硅片直接键合工艺的数学模型, 得到了键合后硅片中杂质的浓度分布。并利用 MATLAB 软件, 编写了键合工艺模拟程序, 计算结果与实验进行了比较。该模型可以为相关器件的研究提供参考。

关键词: 硅片直接键合; 本征氧化层; 扩散; 微机电系统; 功率器件

EEACC: 2560; 2550E; 2575

中图分类号: TN386

文献标识码: A

文章编号: 0253-4177(2003)08-0887-05

1 引言

两片抛光的硅片经适当表面清洗与活化, 可以在室温下直接键合, 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整体, 这种技术称为硅片直接键合技术(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^[1]首次报道以来, 得到广泛重视与快速发展^[2~6]。

在制造功率器件方面, 利用硅/硅键合, 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, 材料性能保持得较好, 键合界面杂质扩散较少, 器件性能容易得到提高^[3]。在 MEMS 技术方面, 利用 SDB 技术可以实现薄膜厚度的精密控制^[4]。

就功率器件而言, 键合界面有电流通过时, 界面处的杂质分布必定会对器件的电学性能产生影响。对 MEMS 结构而言, 杂质扩散对后续自停止腐蚀减薄工艺也有一定影响。因此有必要对键合界面处杂质分布情况进行研究。目前这方面的研究较少, 常用的集成电路工艺模拟软件中(如 SUPREM)也缺少

对键合工艺的模拟。本文将根据键合过程及机理, 建立数学模型, 推导出键合后硅片中杂质的浓度分布, 并用 MATLAB 软件, 编写了键合工艺模拟程序, 为后续的器件模拟提供了必备条件。最后将模拟结果与实验结果进行了比较, 说明本文模型是合适的。

2 键合工艺简述

为了使两抛光硅片在室温下良好地贴合在一起, 必须先对硅片进行表面处理, 使表面吸附 OH 基团, 相接触产生氢键而互相吸引。表面处理方法之一是用氧化性溶液如(H_2SO_4/H_2O_2)使硅片表面形成一层二氧化硅层, 二氧化硅层表面存在有非桥键结构的羟基($-OH$), 为氢键的形成提供了基础。经过表面处理后的硅片表面必然存在一定厚度的本征氧化层。键合时, 界面上的羟基($-OH$)发生聚合反应生成二氧化硅, $Si-OH + OH \rightarrow Si-O-Si + H_2O$, 因此键合硅片界面有氧化层存在。实验证明, 键合好的硅片界面处经退火后, 有 2~3nm 的 SiO_x 存在, 当温度为 1000~2000℃时 x 的值在 2~2.2 之间。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^[7]。由于退火温度一般在 1000℃以上, 于是假定硅片间存在

* 教育部科学与技术研究资助项目(No. 00065)

张佩君 女, 1978 年出生, 硕士研究生, 主要从事 MEMS 模型与模拟研究。

黄庆安 男, 1963 年出生, 教授, 博士生导师, 主要从事微电子技术教学与 MEMS 研究。

2002-09-19 收到, 2002-11-28 定稿

©2003 中国电子学会

一层很薄的厚度恒定的二氧化硅层.

3 键合模型的建立和计算

建立的物理模型如图 1 所示, 两硅片在室温下键合, 中间存在厚度一定的二氧化硅层, 然后经过一定时间和一定温度的高温处理. 下面将推导键合后硅片中杂质分布的解析式. 设两键合硅片初始时为均匀掺杂, 杂质浓度分别为 N_0, N_1 , 中间本征氧化层的厚度为 d . 从右向左的三个区域 Si-SiO₂-Si 用 I、II、III 区表示. 实际键合后, 杂质相互扩散形成的过渡区只有几个 μm, 相对于硅片的厚度很小, 故可将硅片的厚度看作无限大.

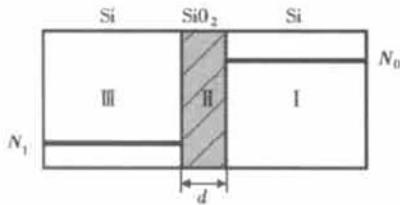


图 1 硅片直接键合模型

Fig. 1 Model of SDB

假设 I 区掺 As, 在 I、II、III 区的扩散系数分别为 D_1, D_2, D_3 . III 区掺 B, 在 III、II、I 区的扩散系数分别为 D_4, D_5, D_6 . 并假定扩散系数在某一区域是常数, 不随浓度变化.

这里杂质扩散系数的选择基于以下理由: 扩散系数跟许多因素有关, 如温度、晶向、硅片的本底浓度及扩散杂质的浓度等. 特别是当本底掺杂和扩散杂质的浓度大于在扩散温度下硅片的本征载流子浓度时, 由于自建电场的“场助效应”, 加快了杂质的扩散, 使扩散系数明显增大. 例如 1100 °C 时, 硅的本征载流子浓度 n_i 约为 $4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, 因此在高浓度一侧, 若 $N_0 > n_i$, 应采用非本征扩散系数 D_e ; 在低浓度侧若 $N_1 < n_i$, 则取本征扩散系数 D_i .

先考虑一种杂质的扩散, 如右侧杂质 As 向左侧的扩散.

在图 2 所示的坐标系中, 设 As 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, 初始浓度为 N_0 . 由于 As 在 Si 和 SiO₂ 中固溶度不一样, 故从 I 区向 II 区扩散时, As 的浓度在 Si-SiO₂ 界面处将按分凝系数 m 的比例进行分配, 即 $C_{11}|_{x=0} = m C_{21}|_{x=0}$.

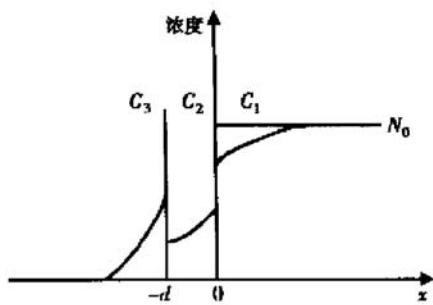


图 2 一侧杂质的扩散模型

Fig. 2 Diffusion model of the impurity from one side

对于 As, m 为 10. 因此, 求 I、II 区内杂质分布的问题就是解定解扩散方程:

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

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

初始条件:

$$C_1(x, 0) = N_0 \quad x > 0 \quad (3)$$

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

边界条件:

$$C_2/C_1 = k = 1/m \quad x = 0 \quad (5)$$

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

解得^[8]:

$$C_1 = \frac{N_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \left[1 + k \sqrt{D_2/D_1} \operatorname{erf} \frac{x}{2 \sqrt{D_1 t}} \right] \quad (7)$$

$$C_2 = \frac{k N_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{|x|}{2 \sqrt{D_2 t}} \quad (8)$$

可以看出, 当 $x = 0$ 时, 即 Si-SiO₂ 界面处的杂质浓度为:

$$C_{11}|_{x=0} = \frac{N_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}} \quad (9)$$

$$C_{21}|_{x=0} = \frac{k N_0}{1 + k \sqrt{D_2/D_1}}$$

都不随时间变化, 也就是说杂质向 II 区的扩散相当于恒定表面源扩散, 遵从余误差函数分布, 正如(8)式所示.

再讨论 As 从 II 区向 III 区的扩散. As 在 II、III 界面处仍要按分凝系数 m 进行分配, 即: $C_{31}|_{x=-d} = m C_{21}|_{x=-d}$, 所以 III 区表面的浓度由 $x = -d$ 处 C_2

的浓度决定:

$$C_3|_{x=-d} = mC_2|_{x=-d} = \frac{N_0}{1+k\sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}} \quad (10)$$

它是随时间变化的函数, 令其为 $f(x)$. 列出 As 在 III 区的扩散方程(先在 $x > 0$ 坐标系中计算, 再变换回原坐标系):

$$\frac{\partial C_3}{\partial t} = D_3 \frac{\partial^2 C_3}{\partial x^2} \quad x > 0, t > 0 \quad (11)$$

初始条件:

$$C_3|_{t=0} = 0 \quad (12)$$

边界条件:

$$C_3|_{x=0} = f(t) \quad (13)$$

其中

$$f(t) = mC_2|_{x=-d} = \frac{N_0}{1+k\sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{d}{2\sqrt{D_2 t}} \quad (14)$$

这是边界条件为非齐次的问题, 用拉普拉斯变换法^[9]求解较为简便. 首先对上面的偏微分方程进行拉氏变换, 考虑到方程在 $x=0$ 处未给出函数导数值, 而对 t 来说, 已知 $t=0$ 时的函数初始值, 所以采用关于 t 的拉氏变换. 令 $\overline{C_3(x, p)}, \overline{f(p)}$ 分别为函数 $C_3(x, t), f(t)$ 关于 t 的拉氏变换. 对扩散方程(11)和边界条件(13)进行拉普拉斯变换, 变换的结果是:

$$\frac{d^2 \overline{C_3(x, p)}}{dx^2} - \frac{p}{D_3} \overline{C_3(x, p)} = 0 \quad (15)$$

$$\overline{C_3(x, p)}|_{x=0} = \overline{f(p)} \quad (16)$$

于是偏微分方程转化为关于 x 的常微分方程, 而且初始条件(12)也一并考虑到.

解为:

$$C_I = C_1 + C_6 = \frac{N_0}{1+k\sqrt{D_2/D_1}} \left[1 + k_0 \sqrt{D_2/D_1} \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{D_1 t}} \right] \\ \pm \frac{x}{2\sqrt{D_6 \pi}} \int_0^t \frac{N_1}{1+k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \operatorname{erfc} \left[\frac{d}{2\sqrt{D_5 \tau}} \right] \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{x^2}{4D_6(t-\tau)}} d\tau \quad (22)$$

$$C_{II} = C_2 + C_5 = \frac{k_0 N_0}{1+k_0 \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \frac{|x|}{2\sqrt{D_2 t}} \pm \frac{k_1 N_1}{1+k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \operatorname{erfc} \frac{x+d}{2\sqrt{D_5 t}} \quad (23)$$

$$C_{III} = C_3 + C_4 = \frac{-(x+d)}{2\sqrt{D_3 \pi}} \int_0^t \frac{N_0}{1+k_0 \sqrt{D_2/D_1}} \operatorname{erfc} \left[\frac{d}{2\sqrt{D_2 \tau}} \right] \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x+d)^2}{4D_3(t-\tau)}} d\tau \\ \pm \frac{N_1}{1+k_1 \sqrt{D_5/D_4}} \left[1 + k_1 \sqrt{D_5/D_4} \operatorname{erf} \frac{-(x+d)}{2\sqrt{D_4 t}} \right] \quad (24)$$

$$\overline{C_3(x, p)} = \overline{f(p)} e^{-\frac{p}{\sqrt{D_3} x}} \quad (17)$$

为了求原定解问题的解 $C_3(x, t)$, 需要对(17)式求拉氏逆变换.

由于

$$L^{-1}[\overline{f(p)}] = f(t) \quad (18)$$

再由拉氏变换表查得

$$L^{-1}\left[\frac{1}{p} e^{-\frac{p}{\sqrt{D_3} x}}\right] = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{2\sqrt{D_3 t}}}^{\infty} e^{-y^2} dy$$

故

$$L^{-1}[e^{-\frac{p}{\sqrt{D_3} x}}] = L^{-1}\left[p \frac{1}{p} e^{-\frac{p}{\sqrt{D_3} x}}\right] \\ = \frac{d}{dt} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\frac{x}{2\sqrt{D_3 t}}}^{\infty} e^{-y^2} dy \right] = \frac{x}{2\sqrt{D_3 \pi t^2}} e^{-\frac{x^2}{4D_3 t^2}} \quad (19)$$

最后利用拉氏变换的卷积性质, 由(18)、(19)式得:

$$C_3(x, t) = L^{-1}[\overline{f(p)} e^{-\frac{p}{\sqrt{D_3} x}}] \\ = \frac{x}{2\sqrt{D_3 \pi}} \int_0^t f(\tau) \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{x^2}{4D_3(t-\tau)}} d\tau \quad (20)$$

将 x 改为 $-x$, , 再利用坐标平移得:

$$C_3(x, t) = \frac{-(x+d)}{2\sqrt{D_3 \pi}} \int_0^t f(\tau) \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x+d)^2}{4D_3(t-\tau)}} d\tau \\ = \frac{-(x+d)}{2\sqrt{D_3 \pi}} \int_0^t \frac{N_0}{1+k\sqrt{D_2/D_1}} \\ \times \operatorname{erfc} \left[\frac{d}{2\sqrt{D_2 \tau}} \right] \frac{1}{(t-\tau)^{3/2}} e^{-\frac{(x+d)^2}{4D_3(t-\tau)}} d\tau \quad (21)$$

这就是 As 在 III 区中的浓度分布.

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, 可得到 III 区杂质在 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:

±号由杂质导电类型而定,本例中 III区杂质为 B,取负号。

为了验证解的正确性,取另一简化模型,即不考虑中间的本征氧化层,也不考虑扩散系数在各区域的不同。模型如图 3 所示,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (25)$$

初始条件:

$$C(x, 0) = N_0 \quad x > 0 \quad (26)$$

$$C(x, 0) = N_1 \quad x < 0 \quad (27)$$

这是一个无限物体中半无限空间杂质扩散的问题。文献已给出它的解^[10]:

$$C(x, t) = \frac{N_0}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \pm \frac{N_1}{2} \left(1 - \operatorname{erf} \frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right) \quad (28)$$

可以验证,在解式(22)、(23)、(24)中,令 $d=0$, $m_{0-1}=1$, $D_{1-6}=D$ 后,经计算化简,所得结果和(28)式一致。

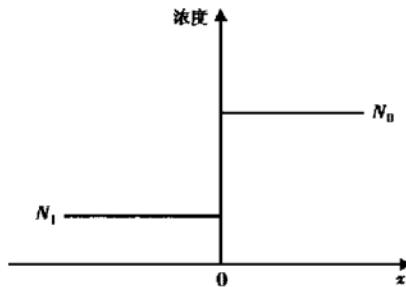


图 3 简化模型

Fig. 3 A simplified model

4 结果与讨论

本文用 MATLAB 编写了键合工艺模拟程序。给出了一个 B 和 As 相互扩散形成 pn 结的例子,模拟结果如图 4~6 所示,程序界面见图 7。模拟所取的数据为 $N_0 = 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $N_1 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, 中间本征氧化层厚度 $d = 3 \text{ nm}$, 温度 1100°C , 键合时间 1.5 h , 分凝系数 As 为 10, B 为 0.3。在高浓度侧取非本征扩散系数 $D_e(\text{As})$ 、 $D_e(\text{B})$, 在低浓度侧取本征扩散系数 $D_i(\text{As})$ 、 $D_i(\text{B})$ 。图 6 的模拟结果与实验值进行了比较,在相同条件下扩散分布和深度相同,符合得较好^[11]。

由于本征氧化层很薄,内部的杂质分布在图中

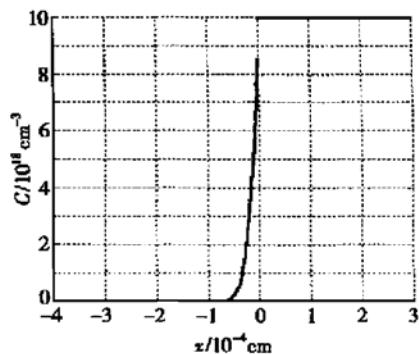


图 4 As 的浓度分布

Fig. 4 Concentration profile of As

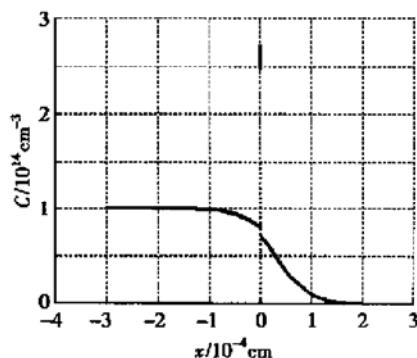


图 5 B 的浓度分布

Fig. 5 Concentration profile of B

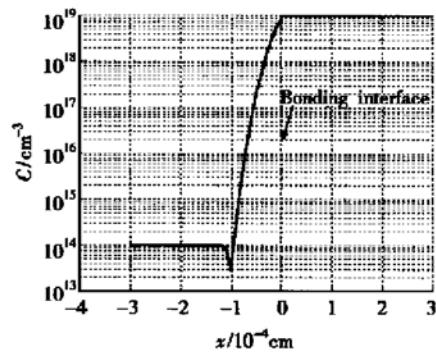


图 6 键合后总杂质浓度分布

Fig. 6 Net impurity distribution after bonding

不明显。从图 4~5 可以看出,掺杂原子通过键合界面的扩散不同于在体硅中的扩散。体硅中的扩散杂质呈连续的缓变分布;而键合界面由于几 nm 本征氧化层的存在,杂质浓度发生了突变。文献表明,只要氧化层厚度小于 3nm,载流子是靠隧道效应通过界面,不会影响电流的传输。从图 6 可看出 pn 结偏离键合界面的距离约为 1μm,由于键合时间相对短,温度相对低,使得杂质的再分布较其他工艺如外延、

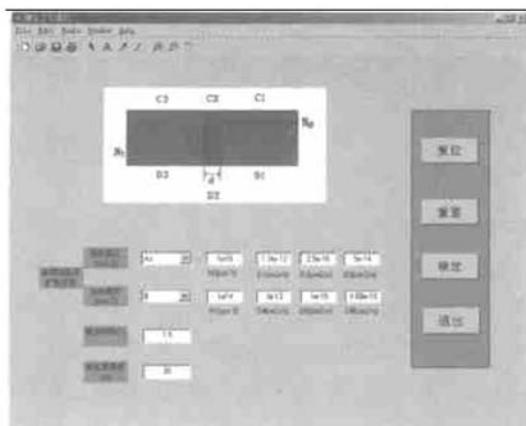


图 7 硅片直接键合工艺模拟程序的界面

Fig. 7 Interface of the process simulation program

扩散更加接近于突变,有利于器件性能的提高。为了简化模型及便于数学计算,文中未考虑中间的本征氧化层厚度随时间的变化及扩散系数随浓度的变化。另外,晶格中断也会影响杂质分布,模型需要通过实验进行进一步修正。

5 结论

本文建立了硅片直接键合工艺杂质扩散的数学模型,得到了键合后硅片中杂质的浓度分布。计算结果与实验符合得较好,提出的模型可以为相关器件研究提供参考。

参考文献

- [1] Lasky J B, Stifter S R, White F R, et al. Silicon-on-insulator by bonding and etch back. Proc Int Electron Device Meeting, USA, 1985: 684
- [2] Shimbo M, Furukawa K, Fukuda K, et al. Silicon to silicon direct bonding. J Appl Phys, 1986, 60: 2987
- [3] Ohashi H, Furukawa K, Atsuta M, et al. Study of Si wafer directly bonded interface effect on power device characteristics. Proc Int Electron Device Meeting, USA, 1987: 678
- [4] Barth P W. Silicon wafer bonding for sensors, actuators and microstructures. Sensors & Actuators, 1990, A21~23: 919
- [5] Tong Q Y, Gosele U. Semiconductor wafer bonding. John Wiley & Sons, 1998
- [6] Hang W H, Yu J Z, Wang Q M. Theoretical analysis of bonding energy at silicon direct bonding interface. Chinese Journal of Semiconductors, 2001, 22(2): 140 (in Chinese) [韩伟华, 余金中, 王启明. 直接键合硅片界面键合能的理论分析. 半导体学报, 2001, 22(2): 140]
- [7] Huang Q A. Silicon micromachining technology. Beijing: Science Press, 1996 [黄庆安. 硅微机械加工技术. 北京: 科学出版社, 1996]
- [8] Crank J. The mathematics of diffusion. London: Oxford University Press, 1957, Chapter2
- [9] Mathematics Group, Nanjing Institute of Technology. Mathematics physics equation and special functions. Beijing: Higher Education Press, 1982 [南京工学院数学教研组. 数学物理方程与特殊函数, 第二版. 北京: 高等教育出版社, 1982]
- [10] Murch G E, Nowick A S. Diffusion in crystalline solids. London: Academic Press, 1984, Chap1
- [11] Chen J N, Huang Q A, Zhang H Z, et al. Impurities at Si/Si direct bonding interface. Research & Progress of SSE, 1993, 13(1): 35 [陈军宁, 黄庆安, 张会珍, 等. 硅/硅直接键合的界面杂质. 固体电子学研究与进展, 1993, 13(1): 35]

Model and Simulation of Impurity Distribution for Silicon Direct Bonding*

Zhang Peijun and Huang Qing'an

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

Abstract: A mathematical model of silicon direct bonding is presented. This model simulates the impurity distribution during bonding according to the law of diffusion in semiconductor and the bonding process. Finally, a process simulation tool of SDB is developed by MATLAB. The results are necessary to study on device characteristics further.

Key words: silicon direct bonding; native oxide; diffusion; MEMS; power device

EEACC: 2560; 2550E; 2575

Article ID: 0253-4177(2003)08-0887-05

* Project supported by Key Foundation of Science & Technology of Ministry of Education of China (No. 00065)

Zhang Peijun female, was born in 1978. She is now a graduate towards MEMS CAD.

Huang Qing'an male, was born in 1963, professor. His interests include MEMS and microelectronic devices.

Received 19 September 2002, revised manuscript received 28 November 2002

©2003 The Chinese Institute of Electronics