

Снижение уровня упругих напряжений в структурах, полученных прямым сращиванием кремния

© Т.С. Аргунова, Р.Ф. Витман, И.В. Грехов, М.Ю. Гуткин*, Л.С. Костина, Т.В. Кудрявцева, А.В. Штурбин**, J. Härtwig***, M. Ohler***, E.D. Kim****, S.Ch. Kim****

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

*Институт проблем машиноведения Российской академии наук, 199178 Санкт-Петербург, Россия

**Санкт-Петербургский государственный технический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия

***European Synchrotron Radiation Facility, Av. des Martyrs-B.P. 220, 38043 Grenoble Cedex, France

****Power Semiconductor Research Laboratory, Korea Electrotechnology Research Institute, P.O. Box 20, Changwon, 641–600 Gyongnam, Rep. of Korea

E-mail: argunova@tania.ioffe.rssi.ru

(Поступила в Редакцию 9 февраля 1999 г.
В окончательной редакции 10 марта 1999 г.)

Упруго-деформированное состояние интерфейса в структурах, полученных прямым сращиванием кремния, было исследовано методами рентгеновской дифракционной топографии и ИК-спектроскопии. Характер контраста, наблюдавшийся на рентгеновских топограммах, и осцилляции интенсивности на ИК-спектрах свидетельствовали о периодическом распределении деформации, обусловленном длиннопериодной микрошероховатостью поверхности срачиваемых пластин. При этом локальная микрошероховатость не превышала 2 \AA и не оказывала заметного влияния на структурное состояние интерфейса. Был проведен сравнительный анализ двух типов структур: (1) с гладким интерфейсом, изготовленных по традиционной технологии срачивания, и (2) с интерфейсом в виде регулярного рельефа. В структурах второго типа было обнаружено снижение уровня деформации более чем на порядок. Предложена модель, объясняющая наблюдавшееся снижение уровня упругих напряжений от сросшихся участков интерфейса как результат упругой релаксации свободных поверхностей полостей искусственного рельефа, выражавшейся в виде их прогиба и перемещения.

Сращивание кремниевых пластин является перспективной технологией, в последние годы нашедшей промышленное применение для изготовления структур, используемых в силовых полупроводниковых приборах и микроэлектронике [1,2]. Применение этой технологии для создания биполярных приборов основано на сращивании термически неокисленных пластин кремния — так называемое прямое Si–Si сращивание [3]. Согласно модели, предложенной в [4,5], идеальное сращивание начинается со слабого электростатического контакта зеркальных поверхностей пластин и завершается в результате отжига формированием бездефектного и ненапряженного Si–Si интерфейса с прочностью, практически равной прочности объемного кремния. Однако путем исследования электрических характеристик p – n -переходов в Si–Si бикристаллах [3,6,7], а также прямыми методами наблюдения структурного качества интерфейса были обнаружены дефекты структуры, оказывающие заметное отрицательное влияние на протекание тока через p – n переход: аморфные слои [8,9], дислокации [3,7] и газовые пузыри [10].

Упругие напряжения в Si–SiO₂–Si структурах были исследованы рядом авторов [11,12]. В работе [11] был сделан вывод, что непланарность поверхности пластин является причиной возникновения упругой деформации и разориентации плоскостей решетки в области интерфейса. Было установлено, что для пластин тол-

щиной $\sim 0.5 \text{ mm}$ максимальное напряжение в направлении, перпендикулярном границе срачивания равно $\sigma_{\max}^{\perp} \cong 9 \times 10^8 \text{ dyn/cm}^2 = 0.09 \text{ GPa}$ [11]. В работе [12] был сделан расчет упругих напряжений, возникающих вследствие сглаживания шероховатых поверхностей контактирующих пластин, по формуле, взятой из теории контактных напряжений. Полученная величина оказалась равна $\sigma_{\max}^{\perp} \cong 1 \times 10^8 \text{ dyn/cm}^2 = 0.01 \text{ GPa}$. Сравнив значение σ_{\max}^{\perp} с напряжением спонтанного зарождения дислокаций в идеальном кристалле, которое было принято равным $2.5 \times 10^{10} \text{ dyn/cm}^2 = 2.5 \text{ GPa}$, авторы пришли к выводу, что напряжения, возникающие в границе срачивания, не влияют на структурное качество интерфейса. Однако многочисленные случаи наблюдения дислокаций вблизи пузырей показывают, что на наиболее нарушенных участках интерфейса возможен переход упругой деформации в пластическую. При высокой температуре имеет место скольжение дислокаций на довольно большие расстояния, особенно при прямом Si–Si сращивании, когда процесс скольжения не затруднен наличием аморфного слоя термического окисла. Но и оставаясь на уровне упругой, деформация тем не менее влияет на подвижность носителей заряда, что было отмечено в ряде работ [13,14]. Таким образом, можно сделать вывод, что снижение уровня упругих напряжений является актуальной задачей в технологии прямого срачивания.

Ранее авторами данной работы был предложен модифицированный метод прямого сращивания [15–17]. В модифицированных структурах интерфейс был специально изготовлен в виде регулярной сетки полостей мезоскопической глубины. Теоретически и экспериментально было показано, что дислокации, возникающие в Si–Si бикристаллах при разориентированном сращивании, притягивались свободными поверхностями канавок. Было продемонстрировано уменьшение плотности зарядовых состояний в p – n структурах с рельефным интерфейсом [18–19].

В данной работе мы продолжаем систематическое изучение свойств структур, изготовленных прямым сращиванием кремния по традиционной [3] и модифицированной [15] технологии. Основное внимание уделено упруго-деформированному состоянию структур. В статье представлены экспериментальные результаты, полученные методами рентгеновской дифракционной топографии и ИК-спектроскопии, а также некоторые результаты теоретического рассмотрения, более подробное изложение которого будет опубликовано отдельно.

1. Образцы и методы исследования

Образцы представляли собой p – n структуры. Исходные пластины были вырезаны из бестигельного кремния ориентации (111) или (100) с удельным сопротивлением $\rho = 30 \Omega \cdot \text{см}$ или из кремния, выращенного по методу Чохральского. Толщина исходных пластин была ~ 0.5 – 1 мм , диаметр равен 20 – 60 мм . Качество обработки их поверхности контролировалось методом атомной силовой микроскопии, и выявленная локальная микрошероховатость не превышала 2 \AA .

При модифицированном сращивании рельеф в виде ортогональной сетки канавок изготавливался на поверхности одной из пластин каждой пары при помощи метода фотолитографии. Параметры рельефа были следующими: ширина канавок — $50 \mu\text{м}$, расстояние между боковыми стенками ближайших канавок — $200 \mu\text{м}$, глубина канавок — 0.3 – $0.5 \mu\text{м}$. Перед сращиванием зеркально отполированные пластины подвергались стандартной отмывке и гидрофилизации с последующей промывкой в деионизованной воде с удельным сопротивлением $\sim 18 \text{ M}\Omega \cdot \text{см}$. Для защиты от пыли соединение пластин перед сращиванием производилось в воде. Отжиг образцов проводился при температуре 95°C в течение 5 часов, при 1000° — в течение 1 часа, а затем при 1100°C в течение 2 часов. При соединении пластин мы не соблюдали их кристаллографического соответствия.

Структурное качество пластин и бикристаллов исследовалось методами рентгеновской дифракционной топографии [20]. В данной работе использовались как методы проекционной топографии на коммерческом источнике рентгеновского излучения [21], так и методы синхротронной топографии [22,23]. Синхротронные эксперименты были проведены в Европейском Центре Синхротронного Излучения (ESRF) в г. Гренобле, Франция,

на линии ID-19, где диапазон энергий равен 8 – 100 keV . На линии ID-19 источник с фокусом $0.15 \times 0.03 \text{ мм}^2$ ($\text{H} \times \text{V}$) расположен на расстоянии 145 м от исследуемого образца, что обеспечивает расходимость пучка $1 \times 0.2 \mu\text{рад}^2$ ($\text{H} \times \text{V}$). Уникальные параметры схемы позволяют формировать рентгеновский пучок, параллельность и когерентность которого очень слабо зависят от расстояния. Геометрическое разрешение схемы меньше $1 \mu\text{м}$, но разрешение фотоматериала — высокоразрешающих KODAK эмульсий — ограничивало его величиной $\sim 1 \mu\text{м}$. Эксперименты проводились как в белом 35 – 50 keV , так и в монохроматическом синхротронном излучении (СИ). Кристалл-монохроматор из высокосовершенного кремния был установлен в симметричное брэгговское отражение (111) для длины волны излучения 0.2 \AA .

Для исследования напряженного состояния интерфейса применялся также метод просвечивающей ИК-спектроскопии в интервале длин волн 2.5 – $25 \mu\text{м}$.

2. Экспериментальные результаты

2.1. Рентгено-дифракционное исследование. В процессе исследования были получены и проанализированы изображения структур с гладким интерфейсом, а также изображения Si–Si бикристаллов, интерфейс которых был изготовлен в виде регулярного рельефа. Для гладких структур контраст изображений, полученных в СИ методе белого пучка, был сходным; существенные отличия возникали только при переходе к монохроматическим изображениям. Рис. 1 демонстрирует рентгеновскую топограмму структуры с гладким интерфейсом, полученную методом белого пучка. На рисунке можно видеть волнообразное усиление и ослабление интенсивности с периодом приблизительно $200 \mu\text{м}$. Зоны сильного контраста вытянуты примерно перпендикулярно плоскости рассеяния. Монохроматические изображения выглядели совсем иначе; они состояли

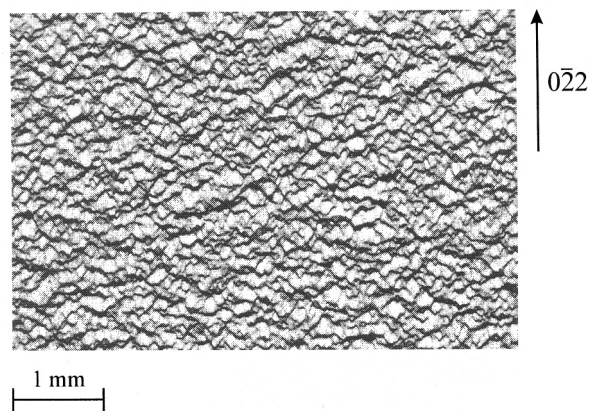


Рис. 1. Типичная рентгеновская топограмма, полученная синхротронным методом белого пучка от структуры с гладким интерфейсом. Отражение $0\bar{2}2$, длина волны излучения $\lambda \approx 0.4 \text{ \AA}$.

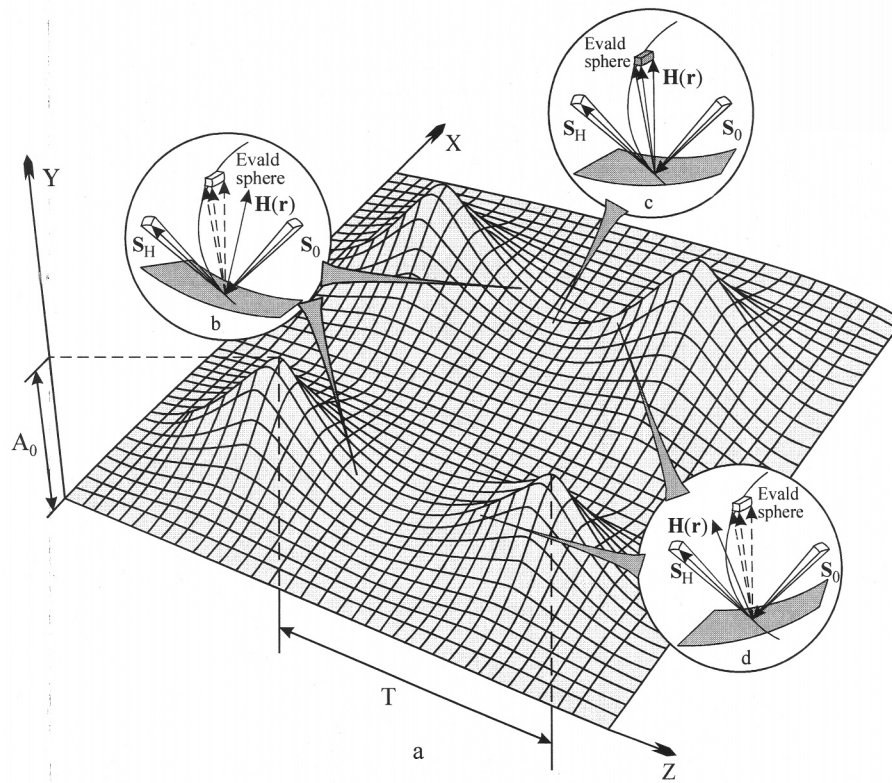


Рис. 2. Схема, объясняющая контраст рентгеновского изображения на рис. 1: *a* — интерфейс синусоидальной формы в бикристаллах без искусственного рельефа; *b, c, d* — рентгеновское отражение от изогнутых плоскостей, представленное в пространстве обратной решетки.

из узких петель, изменявшихся в размере при повороте образца между склонами его кривой отражения.

При изменении межплоскостного расстояния отражающих плоскостей *d*, обусловленном деформацией образца, условия дифракционного отражения не нарушаются до тех пор, пока в потоке "находится" излучение с длиной волны λ , связанной уравнением Вульфа–Брэгга с соответствующим значением *d*. Поскольку в методе белого пучка λ непрерывно меняется в широком интервале значений, чувствительность данной схемы к изменению деформации является низкой. Однако малая угловая расходимость СИ обеспечивает высокую чувствительность схемы к разориентации отражающих плоскостей. Следовательно, причиной контраста на рис. 1 должен быть наклон плоскостей решетки относительно их положения в недеформированном материале. Еще одним подтверждением локальной кривизны плоскостей в исследованных образцах было наблюдение усиления и ослабления контраста в результате фокусировки и дефокусировки отраженной интенсивности. На источнике синхротронного излучения путем изменения расстояние пленка-образец был установлен интервал расстояний, при котором достигается наилучшая фокусировка изображений.

Для объяснения периодического распределения рентгеновской интенсивности на рис. 1 изменение кривизны плоскостей решетки вблизи интерфейса можно предста-

вить в виде синусоиды с периодом *T* и амплитудой A_0 : $A(x) = A_0 \sin(2\pi x/T)$ (рис. 2, *a*). Формирование контраста схематически представлено на рис. 2, *b-d* при помощи построения, выполненного в пространстве обратной решетки. Для возникновения дифракционного отражения нормаль к отражающей плоскости должна быть параллельна дифракционному вектору $\mathbf{H}(\mathbf{r}) = \mathbf{S}_H - \mathbf{S}_0$, где \mathbf{S}_H и \mathbf{S}_0 — радиус-векторы отраженного и падающего пучков соответственно, и конец вектора $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ должен быть расположен в пределах узла на сфере Эвальда, размеры которого определяются расходимостью \mathbf{S}_0 и \mathbf{S}_H пучков (рис. 2, *c*). Контраст зависит от соотношения между величиной угловой расходимости излучения и степенью отклонения отражающей плоскости от ее положения в совершенном кристалле. Отсутствие дифракционного отражения схематически показано на рис. 2, *b, d*: конец вектора $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ выходит за пределы узла на сфере Эвальда.

Оценка величины разориентации плоскостей была выполнена в эксперименте по фокусировке и дефокусировке изображения. На источнике синхронного излучения путем изменения расстояние пленка-образец от 10 см до 1 м было установлено, что наилучшая фокусировка изображений достигалась в интервале расстояний 10–30 см. При использовании белого пучка рентгеновских лучей максимальный наклон плоскостей, равный $2\pi A_0/T_0$, фокусировал отраженные лучи на расстоянии $f = (T_0)^2/(8\pi^2 A_0)$. Для $T_0 = 200 \mu\text{m}$ и $f_0 = 30 \text{ cm}$ мак-

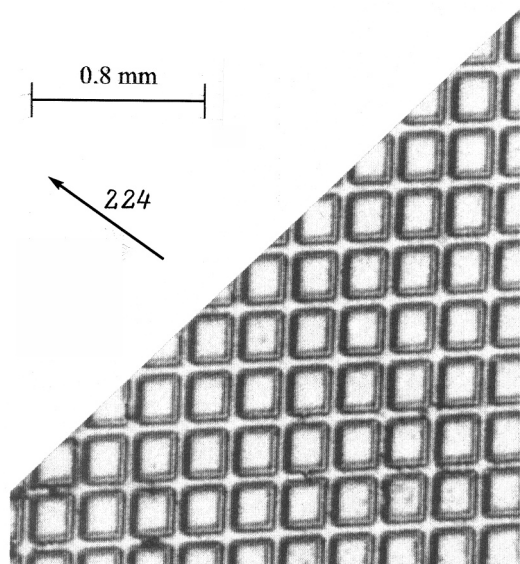


Рис. 3. Рентгеновская проекционная топограмма, полученная методом Берга-Барретта-Ньюкирка на коммерческом источнике излучения. Отражение 224, CuK_α .

симальная разориентация была равна примерно 10 угловым секундам. Столь слабые искажения могли быть зарегистрированы благодаря высокой чувствительности схемы.

Изображения замкнутых петель, которые наблюдались в монохроматическом излучении, не могли быть объяснены на основе эффекта разориентации. Наиболее вероятной причиной их возникновения на топограммах является упругая деформация кристаллической решетки. При установке образца в геометрии Лауэ (прохождение) изображение формируется вследствие дифракции излучения на плоскостях, перпендикулярных поверхности. Таким образом, в монохроматическом излучении характер контраста может быть обусловлен деформацией отражающих плоскостей, перпендикулярных поверхности. На основании серии топограмм, зарегистрированных при разных положениях образца в пределах его кривой отражения, по формуле $\delta\theta = \Delta d/dt \operatorname{tg} \theta + \Delta\omega$ (где θ — угол Брэгга, $\delta\theta$ — изменение величины угла Брэгга, обусловленное деформацией, направленной перпендикулярно к отражающей плоскости или параллельно интерфейсу) была рассчитана величина $(\Delta d/d)_{\parallel}$. При этом величина $\Delta\omega$, где ω — наклон отражающих плоскостей по отношению к интерфейсу, принималась пренебрежимо малой. Оказалось, что изменение угла Брэгга $\delta\theta$, обусловленное деформацией $(\Delta d/d)_{\parallel}$, равно 0.02° , что примерно в 70 раз больше, чем величина изменения этого угла, соответствующая максимальной разориентации. Таким образом, для интерфейса структур, полученных традиционной технологией прямого сращивания, характерны сравнительно слабая разориентация кристаллографических плоскостей ($\sim 10''$) и достаточно сильное относительное изменение межплоскостного расстояния в направлении, параллельном интерфейсу $(\Delta d/d)_{\parallel} = 10^{-3}$.

В работе [11] Si-SiO₂-Si композиции были исследованы методами плосковолновой рентгеновской топографии и дифрактометрии, а гладкость поверхности пластин оценивалась при помощи профилометра. Было показано, что период чередования черно-белого контраста на рентгеновских топограммах коррелировал с периодом микрошероховатости поверхности пластин. Был сделан вывод, что периодический характер рентгеновского контраста обусловлен периодически распределенной микрошероховатостью поверхности сращиваемых пластин. Логично предположить, что и в нашем случае наиболее вероятной причиной возникновения деформации и разориентации кристаллических плоскостей вблизи интерфейса является микрошероховатость поверхности. По данным метода атомной силовой микроскопии, микрошероховатость пластин не превышала 2 \AA . Однако эти измерения проводились в области площадью не более $(1 \times 1) \mu\text{m}^2$. Методы рентгеновской топографии имеют существенно большее поле зрения и позволяют выявить волнистый характер интерфейса в Si-Si бикристаллах, период которого $T \sim 200 \mu\text{m}$.

На рентгеновских топограммах от структур с интерфейсом в виде периодического рельефа, распределение контраста было существенно другим. На рис. 3 показана проекционная топограмма такой структуры, полученная в геометрии Брэгга (отражение) на коммерческом источнике рентгеновского излучения. Из рис. 3 видно, что максимальное изменение интенсивности наблюдается вблизи краев полостей искусственного рельефа. Для проекционных топограмм, полученных в потоке излучения с расходимостью существенно большей, чем расходимость синхротронного излучения, контраст не может быть объяснен на основании эффектов слабой разориентации и слабой деформации, описанных ранее. Для объяснения цвета контраста и его зависимости от направления дифракционного вектора \mathbf{H} рассмотрим соотношение между интегральной интенсивностью отражения и кривизной отражающих плоскостей. Из динамической теории рассеяния известно, что интенсивность отражения увеличивается, когда соблюдается условие $\mathbf{H} \cdot \mathbf{N} > 0$, и она уменьшается при $\mathbf{H} \cdot \mathbf{N} < 0$, где \mathbf{N} — кривизна плоскостей решетки [24]. На рис. 4, с схематически показано сечение участка интерфейса, соответствующего области сращивания между канавками; плоскость сечения перпендикулярна поверхности бикристалла. Дифрагированное излучение формирует изображение на фотопластинке (рис. 4, b). На рисунке дифракционный вектор \mathbf{H} в асимметричной брэгговской геометрии разложен на две составляющие: большую по величине \mathbf{H}_{\perp} , направленную перпендикулярно поверхности, и меньшую по величине \mathbf{H}_{\parallel} , параллельную интерфейсу. Реализация условий $\mathbf{H}_{\perp} \cdot \mathbf{N}_1 > 0$ и $\mathbf{H}_{\perp} \cdot \mathbf{N}_2 < 0$ приводит к возникновению черно-белого контраста на краях изображения каждого фрагмента, соответствующего пространству между канавками. Однако левый край изображения каждого фрагмента более широкий, чем правый. Это можно объяснить вкладом обеих компонент \mathbf{H}_{\perp} и \mathbf{H}_{\parallel} , последняя из которых чувствительна к кривизне \mathbf{N}_3 плоскостей,

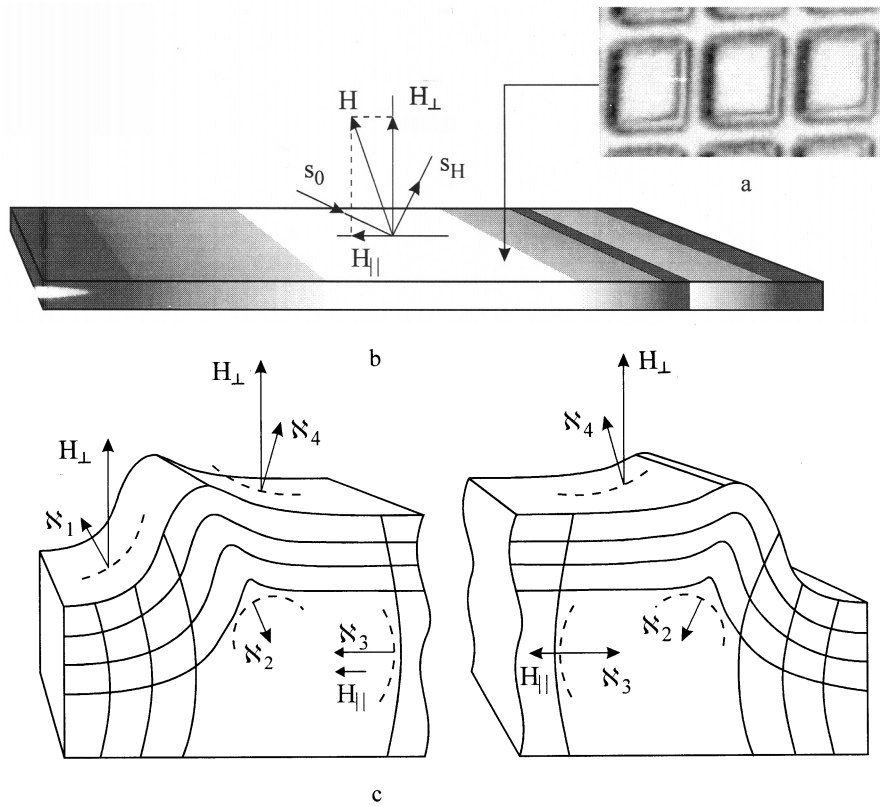


Рис. 4. Схема, объясняющая контраст рентгеновского изображения на рис. 3: *a* — фрагмент топограммы на рис. 3; *b* — фотопластинка со схемой распределения контраста; *c* — сечение одной из пластин бикристалла, на поверхность которой был нанесен искусственный рельеф. \mathbf{H}_{\parallel} и \mathbf{H}_{\perp} — компоненты дифракционного вектора; \mathbf{N}_i — кривизна плоскостей решетки.

перпендикулярных поверхности. Правый край изображения более узкий, потому что здесь компонента \mathbf{H}_{\parallel} не дает вклада в контраст. Дополнительная полоса засветки, видимая у правого края каждого фрагмента, может быть объяснена присутствием кривизны \mathbf{N}_4 и соблюдением условия $\mathbf{H}_{\perp} \cdot \mathbf{N}_4 > 0$. Таким образом, объяснение цвета контраста позволяет сделать вывод, что в структурах с интерфейсом в виде регулярного рельефа свободные поверхности канавок и плоскости решетки вблизи них заметно изгибаются.

2.2. Исследование качества границы сращивания методами просвечивающей ИК-спектрии. На рис. 5 представлены спектры прозрачности трех типичных образцов, измеренные в интервале длин волн 2.5–25 μm . Спектр 1 — это спектр исходного материала с толщиной, равной удвоенной толщине пластин перед сращиванием. Спектры 2 и 3 соответствуют бикристаллам с гладким и рельефным интерфейсом. Анализ полученных данных позволил обнаружить следующие закономерности.

1) На спектрах образцов с гладким интерфейсом наблюдались отчетливые осцилляции пропускания с амплитудой, возрастающей в сторону низких частот.

2) Спектры пропускания структур с мезоскопическим рельефом на интерфейсе содержали слабо выраженные осцилляции с периодом, в несколько раз превышающим период осцилляций для гладких пластин.

3) Для всех образцов после сращивания наблюдалось заметное снижение прозрачности практически во всем диапазоне исследованных длин волн.

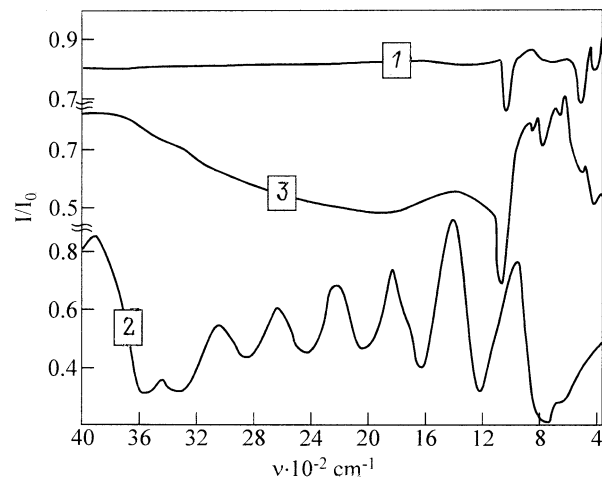


Рис. 5. Относительное пропускание (относительно эталона) различных образцов кремния в зависимости от волнового числа света: 1 — исходный материал; 2 — образец с гладким интерфейсом; 3 — образец с рельефным интерфейсом. Масштабный коэффициент по вертикали: 1 — $(I/I_0) \times 0.8$; 2 — $(I/I_0) \times 2.2$; 3 — $(I/I_0) \times 2.2$.

Можно сделать вывод, что в структурах, полученных прямым сращиванием, присутствует неоднородный по своим оптическим свойствам слой, приводящий к рассеянию потока излучения, распространяющегося сквозь кристалл. Рассеяние света, имеющее осциллирующий характер, называется рассеянием Ми [25]. В качестве причин, вызывающих появление осцилляций пропускания на спектрах исследуемых структур, были рассмотрены как напряженные участки интерфейса, так и возможное присутствие там пузырьков воздуха.

Для отчетливого проявления осцилляций Ми в экспериментах со множественными рассеивателями необходимо выполнение двух условий.

1) Безразмерный параметр рассеяния неоднородностей ρ должен быть достаточно велик

$$\rho = 2\pi \frac{1}{\lambda} l \frac{n - n_0}{n_0} = 2\pi\nu l \frac{\Delta n}{n_0} \gg 1, \quad (1)$$

где l — размер "рассеивателей" (обозначим его l_{air} и l_{strain} для неоднородностей воздушной и деформационной природы соответственно); n — показатель преломления рассеивающей области; n_0 — показатель преломления матрицы; $\Delta n \equiv n - n_0$; λ — длина волны света в вакууме, $\nu = 1/\lambda$ — волновое число.

2) Система "рассеивателей" должна быть достаточно однородна по ρ , т.е. суммарная дисперсия этого параметра $\delta\rho$ должна быть достаточно мала

$$\delta\rho \ll 2\pi. \quad (2)$$

Нетрудно подсчитать, что для системы кремний–воздух, где $\Delta n = 2.4$ и $\delta(\Delta n) \equiv 0$, условие (2) трудно выполнимо уже при разбросе диаметра микровключений $\delta l_{\text{air}} > 1 \mu\text{m}$. Столь малые отличия в размерах пузырьков воздуха на интерфейсе кажутся нам неправдоподобными, и в нашем эксперименте осцилляции на микровключениях воздуха в этом диапазоне длин волн не должны проявляться.

Если изменение деформации вблизи границы сращивания обусловлено микрошероховатостью поверхности контактирующих пластин, то механические напряжения в бикристаллах имеют знакопеременный характер — сжатие в местах контакта двух выступов, и растяжение — в области противостояния двух впадин. Периодический характер распределения напряжений сжатия–растяжения в границе сращивания позволяет ввести понятие рассеивающей области деформационной природы, размер $l_{\text{strain}}^{\parallel}$ который в направлении, параллельном интерфейсу, равен половине периода синусоидальной функции $A(x)$ (рис. 2). Как показал расчет, проделанный в рамках данной работы, механические напряжения логарифмически медленно спадают с расстоянием от интерфейса. Будем считать, что они распространяются вплоть до свободных поверхностей бикристалла. Тогда размер рассеивающей области в направ-

лении, перпендикулярном границе сращивания, равен $l_{\text{strain}}^{\perp} = t = t_{\text{wafer 1}} + t_{\text{wafer 2}}$, где $t_{\text{wafer 1}}$ и $t_{\text{wafer 2}}$ — толщина каждой из пластин. Вследствие этого эффективный параметр рассеяния (1) такой области примет вид $\rho = 2\pi\nu l \frac{\overline{\Delta n}}{n_0}$, где $\overline{\Delta n}$ — среднее значение Δn в структуре, и дисперсия постоянной величины ρ становится равна нулю. Тогда условие (2) выполняется автоматически. Из сказанного выше следует, что наиболее вероятной причиной появления осцилляций пропускания является дифракция света на областях растяжений–сжатий, а вкрапления запертого воздуха приводят лишь к неселективным потерям прозрачности в образцах.

Количественные расчеты осуществлялись с привлечением математического аппарата, разработанного в теории дисперсионных фильтров [26]. Предполагая, что наблюдаемое пропускание I бикристалла есть результат независимого действия двух рассеивающих слоев воздушной и деформационной природы I_{air} и I_{strain} соответственно, можно записать: $I = I_{\text{air}}I_{\text{strain}}$. Величина каждой компоненты оценивалась по формуле [26]

$$I = \exp \left[-\frac{D}{l} 4S(1-S) \sin^2(\pi\nu l \overline{\Delta n}) \right], \quad (3)$$

где D — толщина рассеивающего слоя и S — объемная доля рассеивателей в слое; пусть S_{air} и S_{strain} описывают объемные доли неоднородностей воздушной и деформационной природы соответственно.

Считая, что по толщине рассеивающего слоя укладывается только один слой рассеивателей, для обеих систем можно принять $D/l = 1$, хотя значения величин D и l для воздушных и деформационных рассеивателей различны. Поскольку осцилляции системы воздух–кремний не проявляются во всем диапазоне длин волн, то при записи I_{air} фазовый множитель $\sin^2(\pi\nu l \overline{\Delta n})$ можно заменить его средним значением, равным 1/2.

В итоге получаем выражение

$$I(\nu) = \exp \left\{ -[2S_{\text{air}}(1 - S_{\text{air}}) + 4S_{\text{strain}}(1 - S_{\text{strain}}) \times \sin^2(\pi\nu l_{\text{strain}} \overline{\Delta n})] \right\}. \quad (4)$$

Полученное выражение описывает осциллирующий характер распределения интенсивности в исследованных образцах. Сопоставление кривых 2 и 3 на рис. 5 с выражением (4) позволяет определить некоторые значения входящих в (4) параметров, наиболее важным из которых является величина деформации. Из кривой 2 на рис. 5 следует, что величина периода осцилляций $\Delta\nu$ равна $\Delta\nu = 420 \text{ cm}^{-1} = 4.2 \cdot 10^4 \text{ m}^{-1}$. Опираясь на вид фазового множителя в выражении (4), можно написать $\overline{\Delta n} l_{\text{strain}} = \frac{1}{\Delta\nu}$. Учитывая, что $l_{\text{strain}} = t_{\text{wafer 1}} + t_{\text{wafer 2}} = (0.1 + 0.1) \text{ cm} = 2 \cdot 10^{-3} \text{ m}$, получаем $\overline{\Delta n} = 0.012$ и $\frac{\overline{\Delta n}}{n_0} = \frac{0.012}{3.43} = 3.5 \cdot 10^{-3}$.

Поскольку между Δn давлением P существует линейная зависимость [27]

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dP_\nu} = (-3 \pm 2) 10^3 \text{ dyn}^{-1}, \quad (5)$$

полученную величину можно считать равной величине деформации в структурах с гладким интерфейсом $\left(\frac{\Delta n}{n_0}\right)^{\text{smooth}} = |\epsilon_{yy}^{\text{smooth}}| = 3.5 \cdot 10^{-3}$.

Полученный результат находится в хорошем соответствии с данными рентгеновского эксперимента. Действительно, принимая, что нормальные компоненты деформации вдоль границы равны друг другу, из рентгеновских данных получаем: $\epsilon_{xx} = \epsilon_{zz} \approx 10^{-3}$. Учитывая, что нормальная компонента $\epsilon_{yy} = -\epsilon_{xx}/\nu$, где ν — коэффициент Пуассона $\nu_{\text{Si}} = 0.278$ [28], получаем: $\epsilon_{yy}^{\text{smooth}} = -3.6 \cdot 10^{-3}$.

Напряжение $\sigma_{yy}^{\text{smooth}}$ рассчитываем по формуле

$$\sigma_{yy} = \frac{E}{1 + \nu} \left[\frac{\nu}{1 - 2\nu} (\epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz}) + \epsilon_{yy} \right], \quad (6)$$

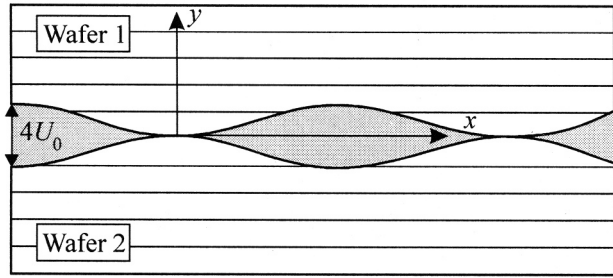
где $E = 1.66 \cdot 10^{-12} \text{ dyn/cm}^2 = 166 \text{ GPa}$ [28] — модуль Юнга.

Подставляя в (6) экспериментально измеренные значения компонент деформации, получаем $\sigma_{yy}^{\text{smooth}} = -6 \cdot 10^9 \text{ dyn/cm}^2 = -0.6 \text{ GPa}$.

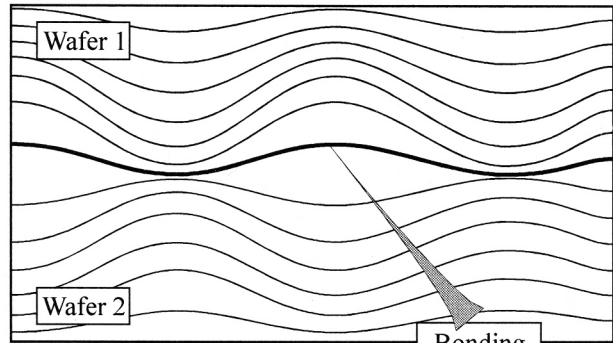
На ИК-спектрах структур с интерфейсом в виде регулярного рельефа период осцилляций $\Delta\nu$ достигал значения $\Delta\nu = 4500 \text{ cm}^{-1} = 4.5 \cdot 10^5 \text{ m}^{-1}$. Следовательно, в рельефных структурах величина деформации была существенно меньше, чем в гладких $\left(\frac{\Delta n}{n_0}\right)^{\text{grooved}} = |\epsilon_{yy}^{\text{grooved}}| = 3.2 \cdot 10^{-4}$. Соответственно этой деформации напряжение равно $\sigma_{yy}^{\text{grooved}} = 5 \cdot 10^8 \text{ dyn/cm}^2 = -0.05 \text{ GPa}$. Полученное значение более чем на порядок ниже величины напряжения в бикристаллах с гладким интерфейсом, исследованных в данной работе, и она почти в 2 раза меньше, чем напряжение, полученное в работе [11].

3. Обсуждение результатов

Полученные в настоящей работе экспериментальные данные можно объяснить, исходя из простейших геометрических моделей контакта шероховатых пластин, как гладких, так и с периодическим рельефом. В случае сращивания пластин с остаточной микрошероховатостью, описываемую синусоидой с периодом T и амплитудой U_0 , наибольших деформаций естественно ожидать при совпадении "вершин холмов", как показано на рис. 6, а. При этом максимальное расстояние, которое должны преодолеть противоположные поверхности чтобы срастись, равно $4U_0$. В процессе сращивания происходит сглаживание поверхностного рельефа, и сглаженный интерфейс, описываемый функцией $A(x) = A_0 \sin(2\pi x/T)$



а



б

Рис. 6. Схематическое изображение контакта двух гладких пластин с амплитудой микрошероховатости поверхности U_0 и периодом T (а) и распределение напряжений по сечению бикристалла, полученного в результате сращивания этих пластин (б).

(рис. 2), становится источником периодически распределенных упругих деформаций (рис. 6, б).

Для расчета упругих полей были использованы специальные модельные конфигурации виртуальных клиновых дисклинаций, мощности и геометрические характеристики которых полностью определяются рельефом исходной микрошероховатости сращиваемых поверхностей и геометрией полученной в итоге границы сращивания. Подробное описание таких моделей и детали расчета упругих полей модельных дисклинационных структур выходят за рамки настоящей статьи. Для примера мы приведем здесь наиболее компактные окончательные выражения для полей упругой дилатации $\epsilon = \epsilon_{xx} + \epsilon_{yy} + \epsilon_{zz} = \delta V/V$, где $\delta V/V$ — относительное изменение объема, создаваемых просто сглаженной границей и сглаженной границей с искусственной ортогональной системой внутренних полостей. Ограничимся рассмотрением двумерного случая, соответствующего задаче о плоской деформации системы. В двумерном случае профиль исходной микрошероховатости зависит только от координат x и y , а упругое поле границы сращивания моделируется полями периодических рядов положительных и отрицательных виртуальных дисклинаций, образующих по одной квадрупольной дисклинационной конфигурации на период T .

¹ В этом выражении P_ν — давление типа гидростатического сжатия.

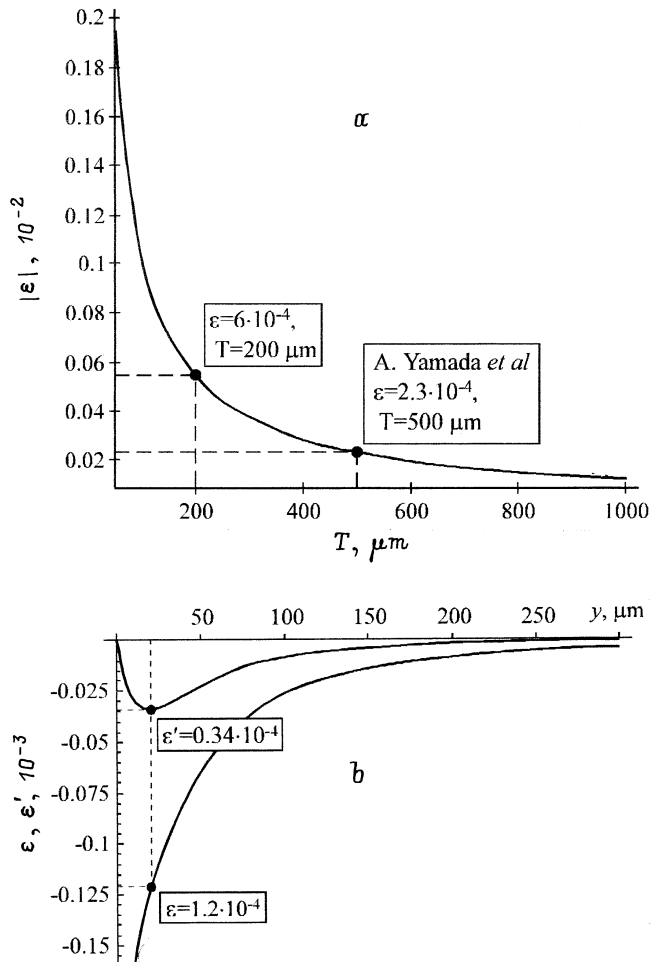


Рис. 7. Упругая дилатация вблизи границы раздела: *a* — зависимость величины дилатации $|\varepsilon|$ в точке $(x = 283.6, y = 0.00208)$ от периода микрошероховатости T при амплитуде $U_0 = 100 \text{ \AA}$. *b* — зависимость дилатации на линии $(x = 0, y)$ в случае гладкого (ε , нижняя кривая) и рельефного (ε' , верхняя кривая) интерфейса.

Пусть вершины холмов соприкасаются в точке $(x = 0, y = 0)$, лежащей в плоскости границы XZ (рис. 6, *a*). Можно показать, что наибольшей величины дилатация ε достигает вдоль линии $x = 0$, нормально пересекающей границу в точке соприкосновения вершин холмов. Вблизи от границы, при $T/|y| \gg 1$, можно записать

$$\varepsilon(x = 0, |y| \ll T) \approx -1.2 \frac{1 - 2\nu U_0}{1 - \nu T} \ln \frac{q^2 T}{2p^2 |y|}. \quad (7)$$

Таким образом, величина ε прямо пропорциональна амплитуде шероховатости U_0 и убывает с ростом периода T по закону $\sim T^{-1} \ln T$. Логарифмическую сингулярность в точке $(0, 0)$ можно устранить, используя в качестве упругих полей виртуальных дисклинаций решения, получаемые не в классической, а в градиентной теории упругости, как это было показано для дислокаций [29,30].

На рис. 7, *a* представлен график зависимости величины дилатации ε от периода микрошероховатости T ,

построенный для значений параметров модели $p = 0.13, q = 0.37$ и амплитуды микрошероховатости $U_0 = 100 \text{ \AA}$. Поскольку в работе [11] были измерены значения всех характеристик, определяющих зависимость, показанную на рис. 7, *a*: период и амплитуда волнистой поверхности пластин, а также величина напряжения в границе раздела после срачивания, представляется возможность проверить справедливость построенной зависимости. По данным работы [11], значению $U_0 = 100 \text{ \AA}$ соответствовал период $500 \mu\text{m}$. На графике этим характеристикам соответствует дилатация $|\varepsilon| = 2.3 \cdot 10^{-4}$. Пересчитывая дилатацию в нормальное напряжение σ_{yy} по формуле (6), получаем $|\sigma_{yy}| = 9 \cdot 10^8 \text{ dyn/cm}^2 = 0.09 \text{ GPa}$. Полученная величина равна значению, измеренному в [11]. В нашем случае характерный период T , измеренный по рентгеновским топограммам, был меньше; он был равен $200 \mu\text{m}$. Как следует из экспериментально определенных компонент деформации и из графика на рис. 7, *a*, амплитуда длиннопериодной микрошероховатости у нас была больше 100 \AA . Таким образом, более шероховатая поверхность явилась причиной более высокого уровня упругих напряжений в нашем случае по сравнению с данными [11,12].

Однако при срачивании пластин, поверхность одной из которой имеет искусственный рельеф в виде сетки канавок (причем период расположения канавок совпадает с периодом остаточной шероховатости пластин, а глубина канавок оказывается намного больше амплитуды шероховатости) наблюдалось эффективное снижение уровня

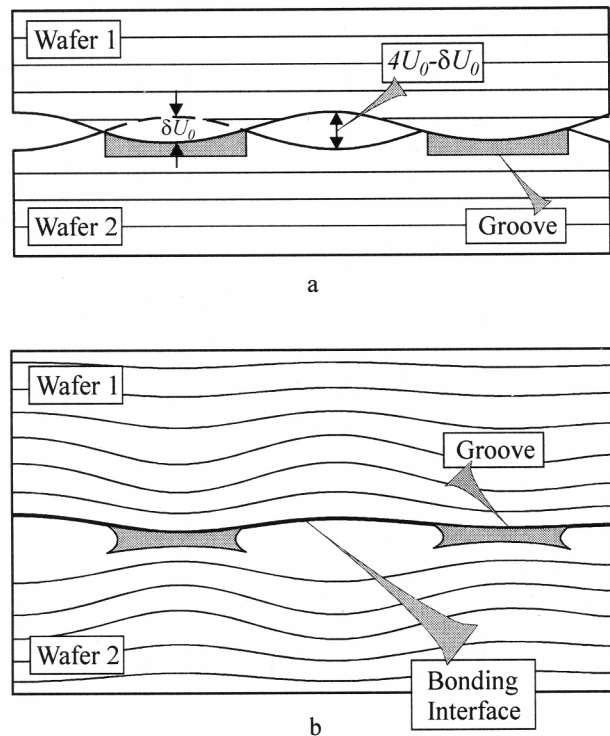


Рис. 8. Схематическое изображение: контакта двух пластин (*a*) и распределения напряжений (*b*) в бикристалле с интерфейсом в виде регулярного рельефа.

упругих деформаций. Основными причинами такого снижения являются уменьшение эффективной амплитуды шероховатости и упругая релаксация свободных поверхностей канавок, выражающаяся в их упругом изгибе и перемещении. Рассмотрим эти причины более подробно.

Поскольку площадь поверхности, приходящаяся на канавки, достаточно велика (в исследованных образцах она составляла порядка 36% общей площади поверхности пластины с рельефом), весьма велика и вероятность попадания "вершин холмов" именно в канавки (рис. 8, *a*). На рисунке рассмотрен случай наиболее эффективного влияния канавок на уровень остаточных упругих деформаций. При этом максимальное расстояние между поверхностями уменьшается на величину δU_0 , которая в наших системах составляла порядка 15% исходного расстояния $4U_0$. Таким образом, можно говорить об эффективном снижении амплитуды шероховатости U_0 на те же 15%. Учитывая линейную зависимость между величиной U_0 и уровнем остаточных упругих деформаций (7), получаем снижение этого уровня на 15%. Однако не эта причина играет ведущую роль в наблюдавшемся более существенном снижении уровня деформации.

Второй и, по-видимому, основной причиной снижения уровня остаточной деформации является упругий изгиб и перемещение свободных поверхностей канавок. В результате сращивания пластин с регулярным поверхностным рельефом образуется граница сращивания, которая занимает примерно 64% от общей площади границы при контакте гладких пластин. Эта часть границы сращивания является источником упругих полей. Одновременно в зоне интерфейса появляются свободные поверхности канавок, превратившихся теперь во внутренние полости; их общая площадь равна примерно 53% от общей площади границы. Естественно, что упругая релаксация этих внутренних свободных поверхностей, схематично показанная на рис. 8, *b* в виде их прогиба, должна эффективно экранировать упругие поля от сросшихся участков, снижая общий уровень упругих деформаций в такой системе.

Для моделирования экранировки упругих полей в теоретическую модель были введены вторичные виртуальные дисклинации, положение которых задавалось параметрами p и s . Значение $s = 0.38$ было выбрано таким образом, чтобы обеспечить равенство $\varepsilon'(x = 0, y \rightarrow 0) = 0$, где ε' — это дилатация в структурах с рельефом. Тогда в случае, когда вершина холма приходится на центр канавки, для дилатации ε' вдоль линии $x = 0$ вблизи границы с регулярным рельефом получаем

$$\varepsilon'(x = 0, y) \approx \frac{1 - 2\nu}{2\pi(1 - \nu)} \omega \left(\frac{1}{2} \ln \frac{q^2 T^2 + y^2}{T^2/4 + y^2} + 1.66 \ln \frac{(p^2 T^2 + y^2)[s^2 T^2 + (y + pT)^2]}{(q^2 T^2 + y^2)(y + pT)^2} \right). \quad (8)$$

Здесь $\omega \approx 7.57U_0/T$ — параметр, характеризующий мощности виртуальных дисклинаций.

На рис. 7, *b* представлены зависимости $\varepsilon(0, y)$ и $\varepsilon'(0, y)$, иллюстрирующие экранирующее действие свободных поверхностей канавок. Экранированная дилатация $\varepsilon'(0, y)$ достигает наибольших (по абсолютной величине) значений порядка $0.34 \cdot 10^{-4}$ вблизи точки $y \approx 20 \mu\text{m}$, в которой дилатация ε от интерфейса без искусственного рельефа почти в 4 раза больше: $\varepsilon \approx 1.2 \cdot 10^{-4}$. Более детальный анализ результатов такого моделирования границы сращивания будет проведен в следующей публикации авторов.

Таким образом, основные результаты проведенного исследования упруго-деформированного состояния интерфейса при прямом сращивании кремниевых пластин, сводятся к следующему.

1) При сращивании пластин длиннопериодная микрошероховатость их поверхности явилась причиной упругого искажения кристаллической решетки вблизи границы сращивания, включавшего компоненты наклона и дилатации плоскостей решетки. Интерфейс в бикристалле, сформировавшийся в результате сглаживания поверхностной микрошероховатости, имел синусоидальную форму $A(y) = A_0 \sin(2\pi x/T)$, где $T \sim 200 \mu\text{m}$.

2) Нормальные механические напряжения в Si-Si структурах с гладким интерфейсом были измерены методами рентгеновской дифракционной топографии и ИК-спектроскопии: $|\sigma_{yy}^{\text{smooth}}| = 0.6 \text{ GPa}$.

3) В структурах с интерфейсом в виде регулярно рельефа, которые сращивались по модифицированной технологии [15], достигнуто снижение уровня нормальных упругих напряжений более чем на порядок: $|\sigma_{yy}^{\text{grooved}}| = 0.05 \text{ GPa}$. При этом в таких структурах наблюдался изгиб свободных поверхностей канавок и плоскостей решетки вблизи них.

4) Путем моделирования упругих полей в границе сращивания при помощи системы виртуальных дефектов было предложено полуколичественное объяснение снижения уровня упругих напряжений в структурах с рельефом. Оно состояло в эффекте экранирования полей упругих напряжений от сросшихся участков интерфейса поверхностями канавок, претерпевших релаксацию, т. е. упругий изгиб и перемещение. Уменьшение эффективной величины микрошероховатости в структурах с рельефом также способствовало снижению уровня напряжений.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 97-02-18331, № 98-02-18250 и № 98-02-18309) и Федеральной целевой программы (ФЦП-РФ) "Интеграция" (проект № 75).

Список литературы

- [1] J.B. Lasky. Appl. Phys. Lett. **48**, 1, 78 (1986).
- [2] W.P. Maszara, G. Goetz, A. Caviglia, J.B. McKittrick. J. Appl. Phys. **64**, 10, 4943 (1988).
- [3] M. Shimbo, K. Furukawa, K. Fukuda, K. Tanzawa. J. Appl. Phys. **60**, 8, 2987 (1986).
- [4] R. Stengl, T. Tan, U. Goesele. Jap. J. Appl. Phys. **28**, 10, 1735 (1989).

- [5] Q.-Y. Tong, U. Goesele. *J. Electrochem. Soc.* **143**, 5, 1773 (1996).
- [6] R. Lindner, R. Hoffman-Tikkanen. *Springer Proc. Phys.* **35**, Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg (1989). **35**, 219.
- [7] A. Laporte, G. Sarrabayrouse, L. Lescouzeres et al. *Proc. 6-th Int. Symposium Power Semiconductor Devices & IC's*. Davos, Switzerland (1994). P. 283.
- [8] T. Abe, A. Uchiyama, K. Yoshizawa, Y. Nakazato, M. Miyawaki, T. Ohmi. *Jap. J. appl. Phys.* **29**, 12, L2315 (1990).
- [9] F. Widdershoven, J. Haisma, J. Naus. *J. Appl. Phys.* **68**, 12, 6253 (1990).
- [10] S. Bengtsson. *J. Electronic Materials* **21**, 8, 841 (1992).
- [11] A. Yamada, Bai-Ling Jiang, G.A. Rozgonyi, H. Shirotory, O. Okabayshi, M. Kawashima. *J. Electrochem. Soc.* **138**, 8, 2468 (1991).
- [12] W.P. Maszara, B-L. Jiang, A. Yamada, G.A. Rosgonyi, H. Baumgart, A.J.R. de Kock. *J. Appl. Phys.* **69**, 1, 257 (1991).
- [13] М.Г. Мильвидский, В.Б. Освенский. Структурные дефекты в эпитаксиальных слоях полупроводников. *Металлургия, М.* (1985). 160 с.
- [14] B-Y. Tsaor, J.C.C. Fan, M.W. Geis. *Appl. Phys. Lett.* **40**, 4, 322 (1982).
- [15] I.V. Grekhov, T.S. Argunova, L.S. Kostina, T.V. Kudryavtzeva, E.D. Kim, S.C. Kim. *Electronics Letters* **31**, 23, 20 (1995).
- [16] Т.С. Аргунова, И.В. Грехов, М.Ю. Гуткин, Л.С. Костина, Е.И. Белякова, Т.В. Кудрявцева, Е.Д. Ким, Д.М. Парк. *ФТТ* **38**, 11, 3361 (1996).
- [17] E.D. Kim, S.C. Kim, J.M. Park, I.V. Grekhov, T.S. Argunova, L.S. Kostina, T.V. Kudryavtzeva. *J. Electrochem. Soc.* **144**, 2, 622 (1997).
- [18] И.В. Грехов, Л.С. Берман, Т.С. Аргунова, Л.С. Костина, Е.И. Белякова, Т.В. Кудрявцева, Е.Д. Ким, С.С. Ким, Д.М. Парк. *Письма в ЖТФ* **22**, 12, 14 (1996).
- [19] T.S. Argunova, I.V. Grekhov, L.S. Kostina, T.V. Kudryavtseva, M.Yu. Gutkin, J. Härtwig, E-D. Kim, S-C. Kim, N-K. Kim. *Jap. J. Appl. Phys.* **37**, 12A, 62 (1998).
- [20] A. Authier., *Adv. X-ray Analysis*. Plenum **10**, 9 (1967).
- [21] "Прямые методы исследования дефектов в кристаллах" / Под ред. А.М. Елистратова. Мир, М. (1965). 351 с.
- [22] "Characterization of Crystal Growth Detected by X-Ray Methods" / Ed. by B.K. Tanner, D.K. Bowen. Plenum, N. Y. (1980).
- [23] R. Barrett, J. Baruchel, J. Härtwig, F. Zontone. *J. Phys.* **D28**, A250 (1995).
- [24] U. Bonse, W.Z. Graeff. *Naturf.* **28a**, 5, 558 (1973).
- [25] К. Борен, Д. Хафмен. Поглощение и рассеяние света малыми частицами. Мир, М. (1986). 660 с.
- [26] Н.А. Борисевич, В.Г. Верещагин, М.А. Велидов. "Инфракрасные фильтры". Наука и Техника, Минск (1971). 226 с.
- [27] M. Cardona, W. Paul, H. Brooks. *J. Phys. Chem Solids* **8**, 204 (1959).
- [28] Ю.А. Концевой, Ю.А. Литвинов, Е.А. Фаттахов. "Пластичность и прочность полупроводниковых материалов и структур". Радио и связь, М. (1982). 240 с.
- [29] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Scripta Materialia* 1996, **35**, 11, 1353 (1996).
- [30] M.Yu. Gutkin, E.C. Aifantis. *Scripta Materialia* **36**, 1, 129 (1997).