

УДК 621.315.592

## РАЗРАБОТКА МОДЕЛИ РАСЧЁТА ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ И ДЕФОРМАЦИЙ В КРЕМНИЕВЫХ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ СТРУКТУРАХ

**А. П. Оксанич**

Кременчугский национальный университет имени Михаила Остроградского  
ул. Первомайская, 20, 39600, г. Кременчуг, Украина. E-mail: [oksanich@kdu.edu.ua](mailto:oksanich@kdu.edu.ua)

**Е. А. Седин**

Криворожский институт Кременчугского университета экономики, информационных технологий и управления  
ул. Революционная, 5, 50006, г. Кривой Рог, Украина. E-mail: [e.a.sedin@gmail.com](mailto:e.a.sedin@gmail.com)

Приведены расчёты термоупругого изгиба и термических напряжений, которые могут быть применены при прогнозировании плотности дислокаций, линий скольжения и других структурных дефектов, появляющихся в кремниевых эпитаксиальных структурах в результате термообработки. Определены максимальные значения напряжений осреднённые значения и их распределения по плоскости кремниевой эпитаксиальной пластины.

**Ключевые слова:** термические напряжения, изгиб, пластины, деформация, дислокации, кристаллографические направления, жёсткость.

## DEVELOPMENT OF MODEL OF CALCULATION OF INTERNAL TENSIONS AND DEFORMATIONS IS IN SILICIC ALL-EPITAXIAL STRUCTURES

**A. P. Oksanich**

Kremenchuk Mykhailo Ostrohradskiy National University  
ul. Pershotravneva, 20, 39600, Kremenchuk, Ukraine. E-mail: [oksanich@kdu.edu.ua](mailto:oksanich@kdu.edu.ua)

**E. A. Sedin**

Kryvyi Rih institute of the Kremenchug university of economics, information technologies and management  
ul. Revolycionnay, 5, 50006, Krivoy rog, Ukraine, E-mail: [e.a.sedin@gmail.com](mailto:e.a.sedin@gmail.com)

Calculations of the thermoelastic bending and thermal stress, which can be used to predict the density of dislocations, slip lines and other structural defects appear insilicon epitaxial structures as a result heat treatments. Determined the maximum value, the average values and their distribution across the plane of the silicon epitaxial wafer.

**Key words:** thermal stress, bending, plate deformation, dislocations, crystalstalograficheskies direction stiffness.

## РОЗРОБКА МОДЕЛІ РОЗРАХУНКУ ВНУТРІШНЬОЇ НАПРУГИ І ДЕФОРМАЦІЇ В КРЕМНІЄВИХ ЕПІТАКСІАЛЬНИХ СТРУКТУРАХ

**А. П. Оксанич**

Кременчуцький національний університет імені Михайла Остроградського  
вул. Першотравнева, 20, 39600, м. Кременчук, Україна. E-mail: [oksanich@kdu.edu.ua](mailto:oksanich@kdu.edu.ua)

**Є. А. Сєдін**

Криворізьський інститут Кременчуцького університету економіки, інформаційних технологій і управління  
вул. Революційна, 5, 50006, Кривий Ріг, Україна. E-mail: [e.a.sedin@gmail.com](mailto:e.a.sedin@gmail.com)

Наведено розрахунки термопружного вигину і термічних напружень, які можуть бути застосовані при прогнозуванні щільності дислокацій, ліній ковзання та інших структурних дефектів, які з'являються в кремнієвих епітаксіальних структурах в результаті термообробки. Визначено максимальні значення напружень осереднені значення та їх розподіл по площині кремнієвої епітаксіальної пластини.

**Ключові слова:** термічні напруги, вигин, пластины, деформация, дислокації, кристаллографічні напрямки, жорсткість.

**АКТУАЛЬНОСТЬ РАБОТЫ.** Из практики изготовления полупроводниковых приборов известно, что повреждённые механической обработкой слои на поверхности, эпитаксиальные, окисные, металлические и другие плёнки, используемые в производстве, обладают высоким уровнем внутренних напряжений [1]. Как правило, это проявляется в деформации изгиба (выпучивание) пластин поверхности, которые обработаны абразивными порошками, при нанесении плёнки на одну сторону, образовании эпитаксиальных или диффузионных слоёв. Особенно высокий уровень деформации изгиба происходит при использовании полупроводниковых пластин большего диаметра.

Проблеме исследования внутренних напряжений в эпитаксиальных плёнках не уделялось достаточно внимания из-за отсутствия надёжных высокопро-

изводительных методов контроля величины и характера поля внутренних напряжений [2]. Это приводило к неконтролируемому появлению на структурах значительных областей с недопустимо большим уровнем плотности дислокаций, линий скольжения, других структурных нарушений, приходящих в дальнейшем к браку в производстве полупроводниковых приборов.

Из сказанного можно сделать вывод, что разработка моделей расчёта внутренних напряжений и деформаций, возникающих при производстве кремниевых эпитаксиальных структур (КЭС) большого диаметра, является весьма актуальной задачей.

Цель работы – разработка математической модели расчёта напряжений и деформаций в КЭС.

**МАТЕРИАЛ И РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЙ.** Учитывая, что в технологии полупроводниковых

матеріалів при діаметрах КЭС 100-200 мм більше значення отримує знання термічних напружень, розвиваються в КЭС в процесі нагріву, а також образуються при цьому складні форми деформацій, в даній роботі вивчається теплове поле со сферически изогнутой кремниевой пластины, находящейся на поверхности горячего пьедестала. Считается, что пластина обменивается теплом с пьедесталом путём теплоизлучения и отдаёт тепло окружающим поверхностям, а также окружающим её газам. Перепад температуры по толщине КЭС считается малым, и поэтому рассматривается только средняя по толщине температура КЭС.

Полученные расчётные значения температуры показывают, что температура зависит от радиуса по параболической зависимости, как это и отражено в [3].

Распределение температуры по радиусу сильно зависит от величины сферического изгиба КЭС. Однако наличие радиального градиента температуры вызывает дополнительный изгиб, что, в свою очередь, приводит к дополнительному изменению температуры.

Приведённые нами расчёты проводятся в приближение линейной теории оболочек [4]. Рассчитывается термоизгиб, моменты напряжений и сами напряжения.

На основании вышеизложенного автором данной статьи предлагается новый механизм, приводящий к сложным формам изгиба, зависящим от анизотропии модуля упругости и коэффициента Пуассона для различных кристаллографических плоскостей и направлений в плоскости КЭС.

В расчёте рассматривается однородная КЭС со сферическим изгибом, нагреваемым с одной стороны.

Изгиб считается малым, материал пластины – удовлетворяющим закону Гука.

В этих условиях уравнения равновесия для круглой КЭС будут иметь вид [5]:

$$\begin{aligned} \frac{d(rN_r)}{dr} &= N_q; \\ Q_r &= N_r \frac{dw}{dr}; \\ \frac{d(rN_r)}{dr} &= M_q - rQ_r; \end{aligned} \quad (1)$$

где  $r$  – радиальная координата;  
 $N_r$  и  $N_\theta$  – радиальные и угловые напряжения;  
 $M_r$  и  $M_\theta$  – изгибающие моменты – радиальный и угловой соответственно;  
 $Q_r$  – изгибающая сила;  
 $w$  – суммарный изгиб пластины;  
 $w_0$  – первоначальный изгиб;  
 $w^1$  – изгиб пластины за счёт деформации:

$$w_0 = \frac{r_0 r^2}{R}, \quad (2)$$

где  $\rho_0$  – зазор между КЭС и пьедесталом;  
 $R$  – радиус КЭС.

Размещение КЭС на пьедестале показано на рис. 1

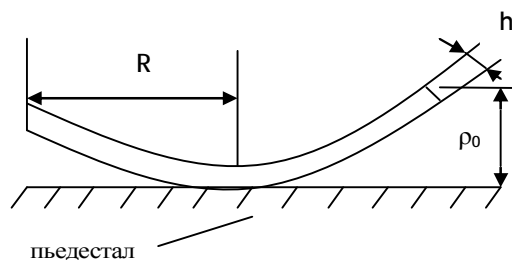


Рисунок 1 – Схема размещения пластинки на плоскости пьедестала

Изгибающие моменты и осреднённые напряжения определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} M_r &= \int_{-h/2}^{h/2} s_r z dz; \\ M_q &= \int_{-h/2}^{h/2} s_q z dz; \\ N_r &= \int_{-h/2}^{h/2} s_r dz; \\ N_q &= \int_{-h/2}^{h/2} s_q dz. \end{aligned} \quad (3)$$

В этих выражениях  $z$  изменяется от  $-0,5h$  до  $+0,5h$ , а  $\sigma_r$  и  $\sigma_\theta$  – радиальные и угловые внутренние напряжения соответственно. Так как вертикальные напряжения и деформация равны нулю, то между напряжениями  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\theta$  деформациями  $\epsilon_r$ ,  $\epsilon_\theta$  имеют место следующие линейные соотношения:

$$\begin{aligned} s_r &= \frac{E}{1-n^2} (e_r + n e_q) - \frac{EaT}{1-n}; \\ s_q &= \frac{E}{1-n^2} (e_q + n e_r) - \frac{EaT}{1-n}, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\epsilon$  – модуль упругости материала КЭС;  
 $\nu$  – коэффициент Пуассона;  
 $\alpha$  – коэффициент термического расширения КЭС.

Связь между осесимметричными деформациями  $\epsilon$ , радиальными  $u$  и нормальным смещением  $w^1$  определяется как

$$\begin{aligned} e_r &= \frac{du}{dr} - z \frac{d^2 w^1}{dr^2}; \\ e_q &= \frac{u}{r} - \frac{z}{r} \frac{dw^1}{dr}. \end{aligned} \quad (5)$$

Отсюда выводятся выражения для напряжений и моментов:

$$N_r = C \left( \frac{du}{dr} + n \frac{u}{r} \right) - \frac{Eh a T}{1-n};$$

$$N_q = C \left( \frac{u}{r} + n \frac{du}{dr} \right) - \frac{Eh\alpha T}{I-n};$$

$$Mr = -D \left( \frac{d^2 w^1}{dr^2} + \frac{n}{r} \frac{dw^1}{dr} \right);$$

$$M_q = -D \left( \frac{1}{r} \frac{dw^1}{dr} + n \frac{d^2 w^1}{dr^2} \right), \quad (6)$$

где  $C$  – обозначена величина  $\frac{Eh^2}{I-n^2}$ , а

$$D = \frac{Eh^3}{I^2(I-n^2)} \text{ – жёсткость КЭС.}$$

После преобразований получаются выражения для внутренних напряжений  $\sigma_r$  и  $\sigma_\theta$ :

$$s_r = \frac{i}{h} N_r - \frac{Ez}{I-n^2} \left( \frac{d^2 w^1}{dr^2} + \frac{i}{r} \frac{dw^1}{dr} \right);$$

$$s_q = \frac{i}{h} N_q - \frac{Ez}{I-g^2} \left( \frac{d^2 w^1}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dw^1}{dr} \right). \quad (7)$$

Касательные напряжения рассчитываются по формуле

$$s_{rz} = \frac{3Nr}{2h} \frac{dw}{dr} \left( I - \frac{4z^2}{h^2} \right).$$

В табл. 1 приведены по данным работы [4] значения величин  $E$ ,  $\nu$ ,  $E/_{1-\nu^2}$  для плоскости (111) и направлений  $\langle 100 \rangle$  и  $\langle 110 \rangle$  плоскости (100) в КЭС.

Таблица 1 – Параметры механических характеристик

Наименование параметра	Плоскость (111) любое направление	
$E$	168 ГПа	
$\nu$	0,358	
$E/_{1-\nu^2}$	194 ГПа	
Наименование параметра	Плоскость (100)	
$E$	$\langle 110 \rangle$	$\langle 110 \rangle$
$\nu$	0,07	0,07
$E/_{1-\nu^2}$	170 ГПа	170 ГПа

Из данных табл. 1 следует, что КЭС, ориентированные по плоскости (111), являются более «жёсткими», чем пластины, ориентированные на плоскости (100). В самой плоскости (100) пластина являет-

ся более «жёсткой» по направлению  $\langle 110 \rangle$  по сравнению с направлением  $\langle 100 \rangle$ .

Из соотношений (7) и табл. 1 становится понятным, почему изгиб в плоскости из направлений  $\langle 100 \rangle$  – как правило – не происходит по направлению  $\langle 110 \rangle$ . Под действием критических напряжений  $\sigma_{rz}$  КЭС теряет устойчивость в одном из слабых направлений  $\langle 100 \rangle$ , например, в направлении [100]. При этом, вследствие высокого значения коэффициента Пуассона при возникновении деформации  $\epsilon_r$  действующее напряжение в перпендикулярном направлении уменьшается, и КЭС устойчивость в этом направлении не теряет.

При дальнейшем росте напряжения в пластине выгоднее потерять устойчивость, изогнувшись в другую сторону, т.к. при этом напряжения, возникающие за счёт действия коэффициента Пуассона, складываются с приложенным напряжением, тогда как при изгибе в одну сторону напряжения, возникающие за счёт коэффициента Пуассона, вычитаются из приложенного напряжения. При этом возникает «антикластический» изгиб.

На рис. 2 нами приведены расчёты термических внутренних напряжений  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\theta$ , развивающихся при нагреве КЭС с радиусом 50 мм, толщиной 0,5 мм на срединной линии КЭС.

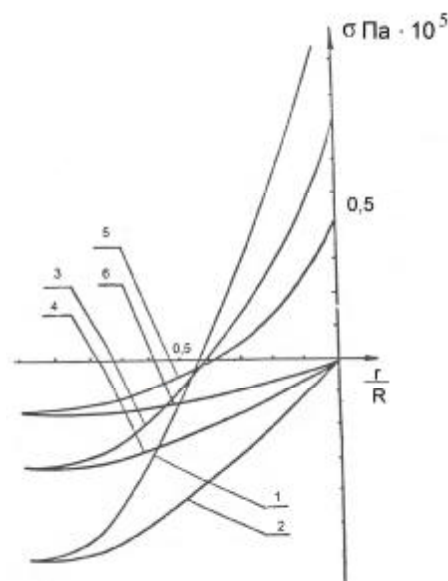


Рисунок 2 – Распределение напряжений  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\theta$  по радиусу  $R=50$  мм;  $h=0,5$  мм; 1 –  $\sigma_\theta$  при  $\rho_0 = 0,1$  мм; 2 –  $\sigma_r$  при  $\rho_0 = 0,1$  мм; 3 –  $\sigma_\theta$  при  $\rho_0 = 0,5$  мм; 4 –  $\sigma_r$  при  $\rho_0 = 0,05$  мм; 5 –  $\sigma_\theta$  при  $\rho_0 = 0,025$  мм; 6 –  $\sigma_r$  при  $\rho_0 = 0,025$  мм

Результаты приводятся для трёх различных значений первоначального зазора – 0,1; 0,05, и 0,025 мм.

Как видно, характер изменения соответствует представлениям о наличии более холодного стягивающего «ободка» на краю пластины и выпирающей середины КЭС.

Поскольку при меньших зазорах радиальный перепад температуры меньше, то и напряжения уменьшаются при уменьшении зазора.

На рис. 3 приведены результаты расчётов значений  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\theta$ ,  $\sigma_{rz}$  для случая КЭС с радиусом 50 мм и зазором 0,005 мм.

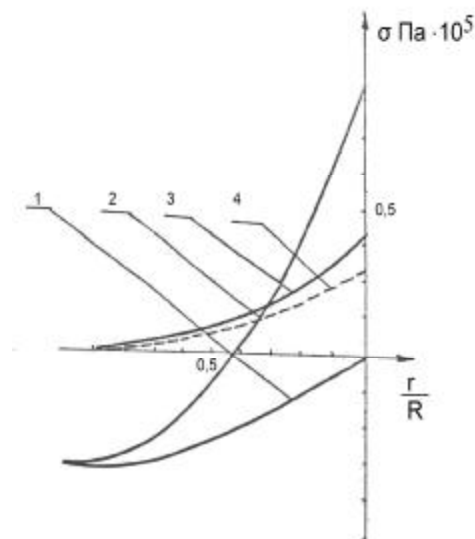


Рисунок 3 – Распределение касательных напряжений на плоскостях скольжения по радиусу  $R = 50$  м;  $h=0,5$  м;  $R = 0,05$  мм; 1 –  $\sigma_\theta$ ; 2 –  $\sigma_r$ ; 3 – максимальное значение напряжения; 4 – осреднённое значение напряжения

Здесь, кроме значений  $\sigma_r$ ,  $\sigma_\theta$ , приводятся для сравнения значения осреднённых по всем плоскостям скольжения пластины КЭС (111) касательных напряжений, поскольку, на наш взгляд, с точки зрения возникающих дислокаций более важным являются не средние значения напряжений, а максимальные значения, приведённые на рис. 3.

**ВЫВОДЫ.** 1. Приведены расчёты термоупругого изгиба и термонапряжений, которые могут быть применены при прогнозировании образования дислокаций, линий скольжения и других структурных дефектов, появляющихся в КЭС в результате термообработок.

2. Показано, что анизотропия упругих свойств кремния в плоскости (100) может влиять на характер изгиба вследствие связи между напряжениями, деформациями и «жесткостью» КЭС через параметр  $E/l_v^2$ , который минимален по направлениям  $\langle 100 \rangle$ .

3. Возникает практическая необходимость в разработке методик исследования внутренних напряжений и форм изгиба в зависимости от кристаллографических направлений в плоскости КЭС.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Голиков В.И., Карбань В.И., Онипко А.Ф. и др. Исследование поверхности монокристаллических подложек для эпитаксии после механической обработки // Полупроводниковая техника и микроэлектроника. – 1973. – Вып. 13. – С. 3–16.
2. Коварский В.Я., Кузнецов Ю.Н., Литвинов Ю.М. Метод промышленного контроля качества поверхности подложек кремния для эпитаксиального наращивания // Электронная промышленность. – 1974. – № 5. – С. 38–42.
3. Зигель А., Хауэлл В. Теплообмен излучением. – М.: Мир. 1976. – С. 381–395.
4. Теория упругости / С.П. Тимошенко, Дж. Гудьер; пер. с англ., под. ред. Г.С. Шапиро – М: Наука, 1979. – 575 с.
5. L.D. Dyer, H.R. Huff, W.W. Boyd. Plastic Deformation in Central Regions of Epitaxial Silicon Slices // J. Appl. Phys. – 1971. – V. 42, № 13. – P. 5680–5688.
6. Wortman J.J., Evans R.A. Young's modulus, shear modulus and poisson's ratio in silicon and germanium // J. Appl. Phys. – 1973. – V. 44, № 1. – P. 534–535.

#### REFERENCES

1. Golikov V.I., Karban V.I., Onipko A.F. etc. The study of the surface of single-crystal substrates for epitaxy after machining // Semiconductor technology and microelectronics. – 1973. – V. 13. – P. 3–16 [in Russian].
2. Kovarsky V. Ya., Kuznetsov Y.N., Litvov Y.M. The method of controlled industrial field surface quality of silicon substrates for epitaxial growth // Electron industry – 1974. – № 5. – P. 38–42 [in Russian].
3. Zigel A., Hayel V. Heat exchange by a radiation. – М.: Mir, 1976. – P. 381–395 [in Russian].
4. Theory of resiliency /S.P. Timochenko, J. Gudier. – М.: Nauka, 1979. – 575 p. [in Russian].
5. L.D. Dyer, H.R. Huff, W.W. Boyd. Plastic Deformation in Central Regions of Epitaxial Silicon Slices // J.Appl.Phys. – 1971. – V. 42, № 13. – P. 5680–5688.
6. Wortman J.J., Evans R.A. Young's modulus, shear modulus and poisson's ratio in silicon and germanium // J. Appl. Phys. – 1973. – V 44, № 1. – P. 534–535.

Стаття надійшла 27.04.2011

Рекомендована до друку  
д.т.н., проф. Петренко В.Р.