

微电子机械系统中的残余应力问题*

RESIDUAL STRESSES IN MICRO-ELECTRO-MECHANICAL SYSTEMS

钱劲^{1,2} 刘¹ 张大成² 赵亚溥¹

(1. 中国科学院力学研究所 非线性力学国家重点实验室, 北京 100080)

(2. 北京大学 微电子学研究所, 北京 100871)

QIAN Jin^{1,2} LIU Cheng¹ ZHANG Dacheng² ZHAO Yapu¹

(1. State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics (LNM), Institute of Mechanics
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China)

(2. Institute of Microelectronics, Peking University, Beijing 100871, China)

摘要 残余应力一直是微系统技术(MST)发展中一个令人关注的问题,它影响着 MEMS 器件设计、加工和封装的全过程。文中考虑薄膜中残余应力的起源,介绍测量残余应力的主要方法,并就计算薄膜中残余应力的 Soney 公式及其推广形式作了详细的讨论,针对微尺度下残余应力对 MEMS 结构力学行为的影响,例如屈曲和粘附等进行了初步的分析。

关键词 微电子机械系统 残余应力 薄膜 屈曲 粘附 响应频率

Abstract Residual stresses in thin films are always a major concern in micromachining technology. In design, fabrication and packaging processes of MEMS, residual stresses all through operate as an influential factor. The derivation of residual stresses in thin films is considered in this paper, and some measurements are introduced. The Soney formula and its extensions, are discussed to calculate residual stresses in thin films. Residual stresses affect mechanical behavior of microstructures strongly, such as buckling and adhesion of microbeams.

Key words Micro-electro-mechanical system; Residual stresses; Thin films; Buckling; Adhesion; Resonant frequency

Correspondent: ZHAO Yapu, E-mail: yzhao@lnm.imech.ac.cn, Fax: +86-10-62561284

The funding for this project was provided by a subproject of "973 Project" entitled MOEMS. Contract (No. G19990331103).

Manuscript received 20010627, in revised form 20010828.

1 引言

微电子机械系统(MEMS)是指将微机械和 IC(Integrate Circuit)集成在一起的,可以完成某种特定功能的系统。MEMS 的诞生和发展,是新的新技术产业生长点,并将导致 21 世纪的一场新的产业革命^[1]。目前,微电子机械系统(MEMS)通常采用与传统的 IC 工艺相兼容的表面硅微加工方法,结构是经过先在牺牲层上形成平板或者梁结构,然后再腐蚀掉牺牲层而得到。这种工艺不可缺少的步骤是在基底上沉积薄膜,由于在淀积和退火过程中的温度变化,薄膜中不可避免地会产生残余应力^[1,2]。这种应力作用有时非常显著,在腐蚀牺牲层,即释放结构时会引起结构的失稳、弯曲甚至断裂;残余应力还会影响结构的工作性能,比如会改变谐振结构的共振频率,进而影响结构对外界的响应。以上残余应力的不良影响本文都将详细讨论。

2 薄膜中残余应力的起源

通常认为,薄膜中的残余应力分为热应力(extrinsic stress)和内应力(intrinsic stress)两种。热应力是由

于薄膜和基底材料热膨胀系数的差异引起的,所以也称为热失配应力。热膨胀系数是材料的固有性质,不同种类材料之间热膨胀系数可能有很大差异,这种差异是薄膜在基底上外延生长时产生残余应力的主要原因^[3]。这种应力对应的弹性应变为

$$\epsilon_{th} = [\alpha_f(T) - \alpha_s(T)] dT \quad (1)$$

式中 α 为热膨胀系数,下标 f 代表薄膜,下标 s 代表基底。根据 Hooke's 定律,应力为

$$\sigma_{th} = \left[\frac{E}{1 - \nu} \right] \epsilon_{th} \quad (2)$$

式中 E 和 ν 分别代表薄膜的弹性模量和泊松比。

内应力也称为本征应力,其起因比较复杂。目前存在一些不同观点,其中一种观点认为内应力是由晶格失配引起的,如图 1。晶格失配产生了图中所示的刃型位错,位错在其周围形成相应的弹性应力场。

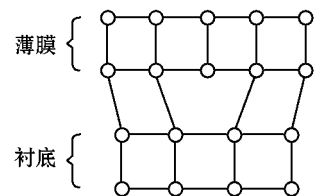


图 1 由于晶格失配而产生的刃型失配位错

Fig. 1 Edge dislocation by lattice mismatch

* 20010627 收到初稿,20010828 收到修改稿。国家重点基础研究发展规划(973)项目——“集成微光机电系统研究”子项目资助(G19990331103)。

定义失配度 $(a_s - a_f) / a_f$, 它表征了晶格失配的程度大小, a 为晶格常数。

对于薄膜—基底晶格常数失配在薄膜中产生的内应力 σ_i 由 Hoffman 的晶界松弛模型得到^[4]

$$\sigma_i = \left(\frac{E_f}{1 - \nu_f} \right) \frac{x - a}{a} = \left(\frac{E_f}{1 - \nu_f} \right) \frac{x - a}{L_g} \quad (3)$$

式中 a 为薄膜材料无残余应力时的晶格常数, $x - a$ 为由于薄膜和基底晶格常数失配引起的薄膜晶格常数的变化, L_g 为晶界松弛距离, L_g 为晶体尺寸。

通常薄膜中的内应力要大于热应力。程开甲^[5]等指出, 在薄膜中传统意义上的内应力、热应力的量级通常低于 GPa, 而实验测量结果发现薄膜中的应力水平达到几个 GPa。所以上述的点阵失配模型只在一定范围内适用。最近, 程开甲应用改进的 TFD 理论和弹性力学方法分析了薄膜本征应力的产生机制, 指出本征应力起源于薄膜与基底材料的表面电子密度差, 是界面电子密度连续条件的必然结果。薄膜和基底在界面附近两侧为了使电子密度达到一个相等的值, 就会在界面处产生较大的应力。根据程氏理论, 薄膜本征应力大小为^[5]

$$P \cong (dp/dn)_1 (n_{20} - n_{10}) \quad (4)$$

式中 $(dp/dn)_1$ 是薄膜材料的内压力对电子密度的微分, n_{10} 和 n_{20} 分别是薄膜与基底的原子表面电子密度, 对于同一种薄膜材料 $(dp/dn)_1$ 为定值, 因此薄膜应力正比与薄膜和基底的表面电子密度差。该理论揭示了一条控制薄膜残余应力的途径, 通过适当的掺杂, 使基底与薄膜的表面电子密度差降低, 即可减小残余应力。

3 薄膜中残余应力的计算

3.1 Stoney 公式

在薄膜残余应力的作用下, 基底会发生挠曲, 这种变形尽管很微小, 但通过激光干涉仪或者表面轮廓仪, 能够测量到挠曲的曲率半径。基底挠曲的程度反映了薄膜残余应力的大小, Stoney^[6] 给出了二者之间的关系

$$\sigma_f = \left(\frac{E_s}{1 - \nu_s} \right) \frac{t_s^2}{6 n t_f} \quad (5)$$

式中下标 f 和 s 分别对应于薄膜和基底, t 为厚度, r 为曲率半径, E 和 ν 分别是基底的弹性模量和泊松比。Stoney 公式广泛应用于计算薄膜的残余应力, 但使用时应明确该公式的适用范围, Stoney 公式采取了如下假设^[7]

- 1) $t_f \ll t_s$ 即薄膜厚度远小于基底厚度。这一条件通常都能被满足, 实际情况下薄膜和基底厚度相差非常大。
- 2) $E_f \approx E_s$ 即基底与薄膜的弹性模量相近。
- 3) 基底材料是均质的、各向同性的、线弹性的, 且基底初始状态没有挠曲。

4) 薄膜材料是各向同性的, 薄膜残余应力为双轴应力。

5) 薄膜残余应力沿厚度方向均匀分布。

6) 小变形, 并且薄膜边缘部分对应力的影响非常微小。

实际上, 很多情况并不能完全满足上述假设, Stoney 公式需作必要的推广。

3.2 多层薄膜的情形

使用牺牲层工艺加工 MEMS 结构时, 经常需要在基底上淀积多层薄膜。这种情况下, 尽管薄膜有很多层, 但与基底的厚度相比, 薄膜的总厚度还是非常小, 仍然满足 Stoney 公式的第一条假设。每淀积一层薄膜, 该层薄膜中的残余应力都对基底施加一个单独的弯矩作用, 从而使基底的曲率发生变化。各层薄膜对基底的弯矩作用满足线性叠加原理, 所以, 对于 n 层薄膜 Stoney 公式化为如下形式^[8]

$$\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \dots + \frac{1}{r_n} = \left(\frac{1 - \nu_s}{E_s} \right) \frac{6}{t_s^2} (\sigma_{f1} t_{f1} + \sigma_{f2} t_{f2} + \dots + \sigma_{fn} t_{fn}) \quad (6)$$

式中下标 $1, 2, \dots, n$ 分别代表各层薄膜的编号, σ_{fi} 为残余应力, 其余字符的意义与式 (5) 相同。

3.3 薄膜厚度与基底厚度可比时的情形

如图 2, t_f 和 t_s 相差不大, 采取图中所示的柱坐标系, 显然, 不为零的残余应力分量只有 $\sigma_r(r, z)$ 和 $\sigma_z(r, z)$, 相应的弹性应变能密度为

$$U(r, z) = \frac{E}{2(1 - \nu^2)} [\sigma_r(r, z)^2 + \sigma_z(r, z)^2 + 2\nu \sigma_r(r, z) \sigma_z(r, z)] \quad (7)$$

其中 ϵ_r 和 ϵ_z 为应变分量, 根据图 3 它们分别等于

$$\epsilon_r = u(r) - z w'(r) + \epsilon_m \quad (8a)$$

$$\epsilon_z = u(r)/r - z w'(r)/r + \epsilon_m \quad (8b)$$

式 (8a)、(8b) 中的 ϵ_m 是前面提到的失配度, $u(r)$ 和 $w(r)$ 代表基底中面的位移。

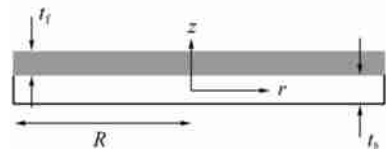


图 2 (Fig. 2)

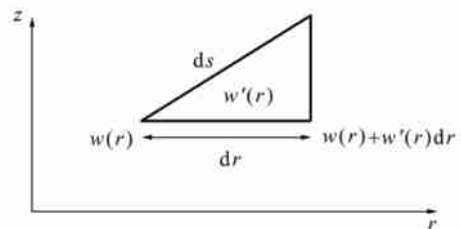


图 3 柱坐标系下由于基底中面转动引起的应变
Fig. 3 The extensional strain arising from rotation of the substrate midplane

小变形时 $u(r)$ 和 $w(r)$ 分别为

$$u(r) = \epsilon_0 r + \frac{m}{2} r^2 \quad w(r) = \frac{r^2}{2} \quad (9)$$

ϵ_0 是基底中面的应变,基底的曲率用 m 表示。将式(9)代入式(8),再将式(8)代入式(7),得到用 ϵ_0 和 m 表示的应变总能量

$$V(\epsilon_0, m) = 2 \int_0^R \int_{-t_s/2}^{t_f+t_s/2} U(r, z) r dr dz \quad (10)$$

应变能处于平衡状态需满足 $\partial V / \partial \epsilon_0 = 0, \partial V / \partial m = 0$ 。即导出

$$\epsilon_0 = \frac{6m}{t_s} \ln \left[\frac{1+l}{1+lm(4+6l+4l^2)+l^4m^2} \right] \quad (11)$$

其中 $l = t_f/t_s$, 即薄膜与基底的厚度比, $m = E_f/E_s$ 为薄膜与基底的弹性模量比。当 $t_f \ll t_s$ ($l \ll 1$) 时,式(11)退化为 Stoney 公式。但当薄膜厚度与基底厚度可比时,例如 $m = 1, l = 0.1$ 的情况,Stoney 公式会有 30% 左右的误差^[9]。

3.4 一级近似的薄膜应力梯度分布

前面介绍的 Stoney 公式假定薄膜的厚度很薄,残余应力在薄膜厚度方向是均匀分布的。实际上,薄膜应力在厚度方向是有梯度的,这可从图 4 得到证明。图中的微梁结构在腐蚀掉牺牲层(释放结构)后,即发生了偏转,如果应力只是均匀分布,那么微梁只会伸长或缩短,而不会发生图中所示的变形状况。

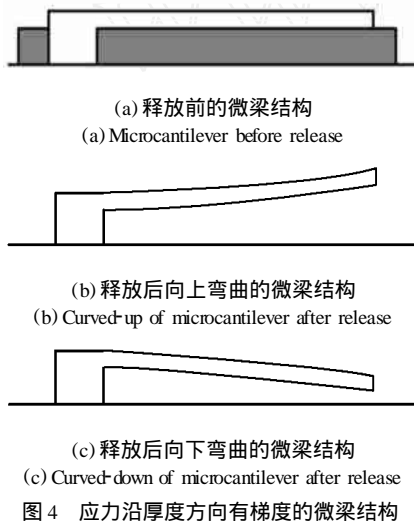


图 4 应力沿厚度方向有梯度的微梁结构

通常,薄膜的单轴应力沿厚度方向的分布可用多项式表示为

$$\sigma_{total} = \sum_{k=0}^k \sigma_k \left(\frac{z}{t/2} \right)^k \quad (12)$$

其中 z 为厚度方向的坐标, t 为薄膜厚度。一般计算取 $k = 1$ 的情况(即一级近似)

$$\sigma = \sigma_0 \pm \frac{\sigma_1}{t/2} z \quad (13)$$

式(13)取加号时对应拉应力,取减号时对应压应力。图 5 给出一级近似的薄膜应力梯度分布。

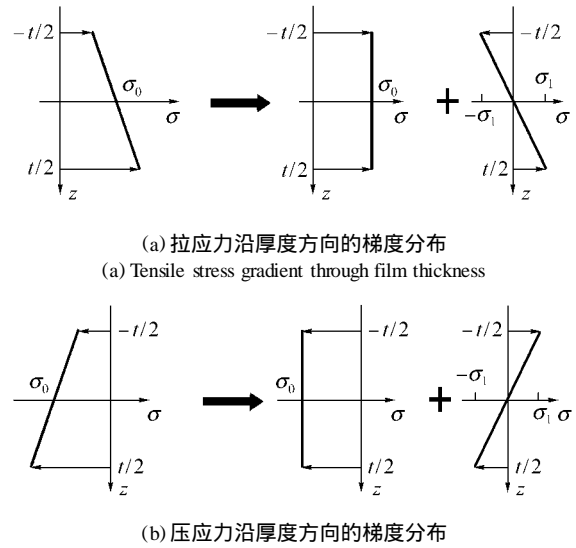


图 5 薄膜应力沿厚度方向的梯度分布(一级近似)
Fig. 5 Gradient distribution of residual stress through film thickness (first order approximation)

关于残余应力的梯度分布使微梁结构产生偏转的有关计算将在后面讨论。

4 薄膜残余应力的测量和控制

目前国内外已对薄膜中的残余应力进行了大量的模拟计算,这对了解和初步预测薄膜的力学行为具有一定的指导意义。然而,大多数计算模型往往存在一些限制条件,如只能计算具有一定几何形状的器件,或只适用于某些类型材料中的残余应力计算。此外更为重要的是,一方面 MEMS 器件在其一系列加工工艺过程中以及服役过程中会受到热载荷、机械载荷作用、化学物质的侵扰及经历蠕变等过程,这些均会使器件材料内部的残余应力状况发生改变。另一方面,由于 MEMS 器件尺寸较小,各组成材料的力学性能具有尺寸效应,因而与材料宏观力学行为存在一定的差异。以上这些因素都增加了残余应力模拟计算上的困难。因此, MEMS 中残余应力的实验测量成为必然。

薄膜中残余应力测量的最常用的方法是基于基底的弯曲规律进行的,如基底曲率法。此外,还有通过薄膜中应力释放使旋转梁发生偏转的微旋转结构法(Micro-rotating structures)测量薄膜中应力^[10]。更为复杂的能够进行原位测量局部微小区域残余应力的方法则包括 X 射线衍射法、喇曼光谱法^[11]等。基底曲率法和微旋转结构法测定的应力大小与用 X 射线衍射法和喇曼光谱法测定的应力存在一定的差异。这是因为前两种方法是通过测量材料整体的宏观位移测定残余应力的,而后两种方法则是通过测量材料内部微观结构变形,得到被测试的局部区域的残余应力大小。下几节将着重介绍基底曲率法和 X 射线衍射法进行的残余应力的测量,并探讨残余应力的控制手段。

4.1 基底曲率法

薄膜中的应力将会使基底产生弯曲。其中拉应力使基底呈凹形,而压应力使基底呈凸形。薄膜中残余应力测定的最常用的方法是基于基底的弯曲规律进行的,即基底曲率法,这种方法的理论依据就是 Stoney 公式。

Kruevitch^[12] 等用基底曲率法研究了低压化学气相沉积 (LPVCD) 的沉积温度对制备出的多晶硅薄膜中残余应力的影响。图 6 给出了多晶硅薄膜中平均残余应力随沉积温度变化的结果,发现沉积温度为 605 时,多晶硅薄膜内的平均残余应力为拉应力,而在 630~700 沉积温度范围,平均残余应力为压应力,且随温度升高,平均残余压应力下降。因此,通过适当控制沉积温度可以使薄膜内的平均残余应力较小。另外,他们使用 CCl_4-O_2 等离子体对薄膜进行逐层刻蚀,通过刻蚀前后基底曲率半径变化的测量,得到沿薄膜厚度方向残余应力的分布情况。图 7、图 8 分别为沉积温度为 605 和 650 时多晶硅薄膜厚度方向上的残余应力分布图。由于沉积温度不同,残余应力的分布也不同。图 7 中距薄膜表面小于 $0.2 \mu m$ 的区域,残余应力为压应力,而在距薄膜表面大于 $0.2 \mu m$ 的区域,残余应力为拉应力。残余应力状态与薄膜的微观结构有关。由于多晶硅的结晶温度为 600 左右,因此 LPCVD 法制备的多晶硅在化学反应室中最初形态为非晶态,然后逐步转化为结晶态。透射电子显微镜 (TEM) 分析表明薄膜的表层区域为非晶态,深层区为结晶态。当非晶态向结晶态转变过程中,非晶态区试图发生收缩,但却受到周围结晶区域或基底的束缚,因此在薄膜结晶区产生了拉应力。当沉积温度超过 630,薄膜厚度方向上的残余应力均为压应力(图 8)。TEM 分析表明薄膜与基底界面附近有微晶过渡层,薄膜中残余应力大小与微晶过渡层的厚度有关。当沉积温度达到 700 时微晶过渡层完全消失。

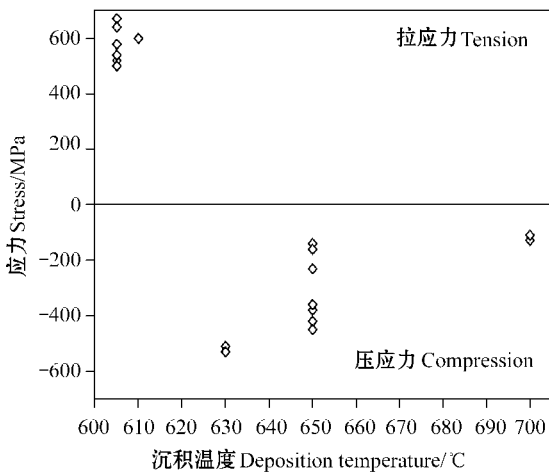


图 6 多晶硅薄膜中平均残余应力—沉积温度图
Fig. 6 Polysilicon film stress vs. deposition temperature

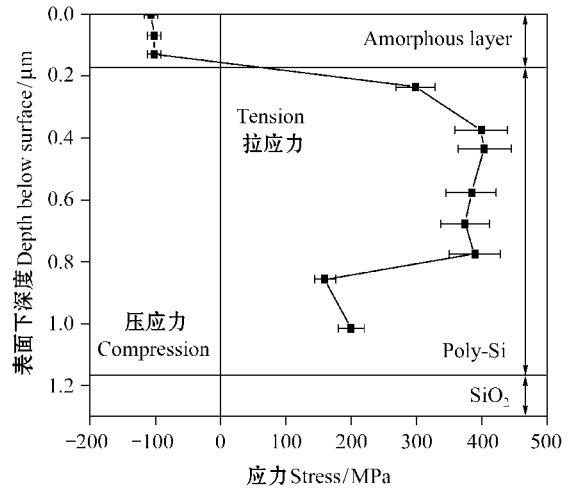


图 7 多晶硅薄膜厚度方向上残余应力分布图(沉积温度 605)
Fig. 7 Stress profile of the polysilicon film at 605

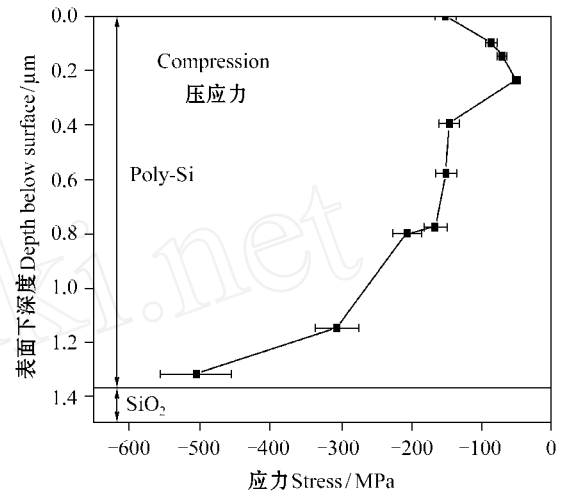


图 8 多晶硅薄膜厚度方向上残余应力分布图(沉积温度 650)
Fig. 8 Stress profile of the polysilicon film at 650

4.2 X射线衍射法

X射线衍射法是目前用于测定残余应力的最广泛、最成熟的方法。它可在一个很小的区域内对材料的组成相中的残余应力进行无损测量,更适合于膜厚小于 $10 \mu m$ 的薄膜中残余应力的测量^[13]。X射线衍射法测定材料中残余应力的原理是因为物体内部存在的残余应力,使得晶体的晶格发生弹性变形,即晶面间距发生了变化。通过晶体的 Bragg 衍射

$$2d \sin \theta = n \tag{14}$$

(式中 θ 为半衍射角, d 为晶面间距, λ 为入射波长)便反映在相应于某一晶面族的衍射峰发生了位移。对于多晶材料,不同晶粒中的同族晶面间距随这些晶面相对于应力方向的改变发生规则的变化。当应力方向平行于晶面时,晶面间距最小;当应力方向与晶面垂直时,晶面间距最大。因此,只要测出不同方向上同族晶面的间距,根据弹性力学原理就可计算出残余应力的大小。用 X 射线法对 PVD 法制备的薄膜中残余应力的研究表明,薄膜中存在着三种类型的晶格变形(如图 9 所示)。

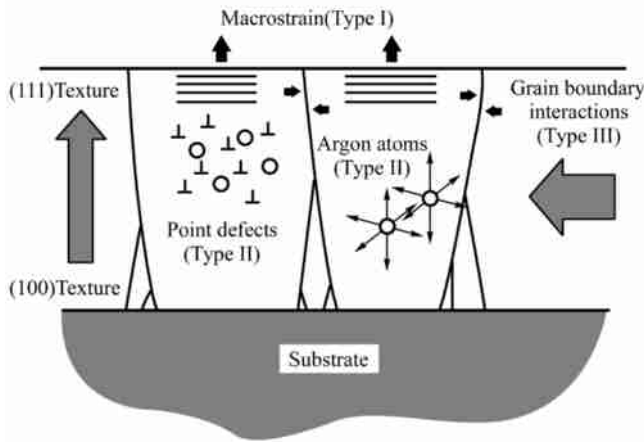


图 9 PVD 法制备的薄膜中三种类型晶格变形示意图
Fig.9 Schematic of the three types of lattice distortions found in PVD thin films

第一种是薄膜与基底的热错配引起的宏观应变,它会使得衍射线向某方向位移。第二种是位错、点缺陷等引起的微观应变,它会使得衍射线的漫散宽化。第三种是不同晶粒间存在的各向异性产生的微观应变,它会使得衍射线的位移与宽化。

X 射线衍射法测量残余应力中最常用的方法是 \sin^2 法,其基本原理简述如下。图 10 为测试的试样表面,图中 σ_1 、 σ_2 和 σ_3 为主应力方向。由于 X 射线对物体的穿入能力有限,因而 X 射线测量的是物体表层应力(记为 σ_ϕ)。因为物体表层不受外力时即处于平面应力状态,所以 $\sigma_3 = 0$ 。设任意方向应变为

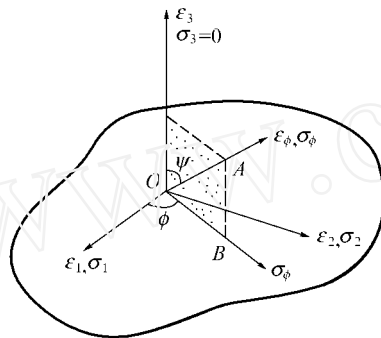
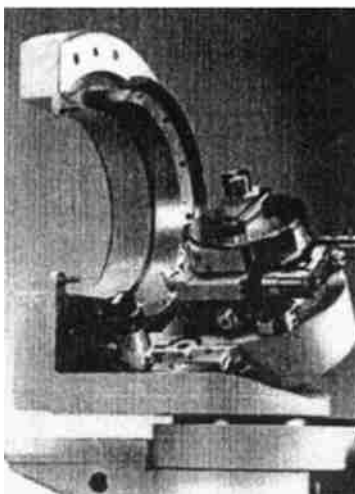
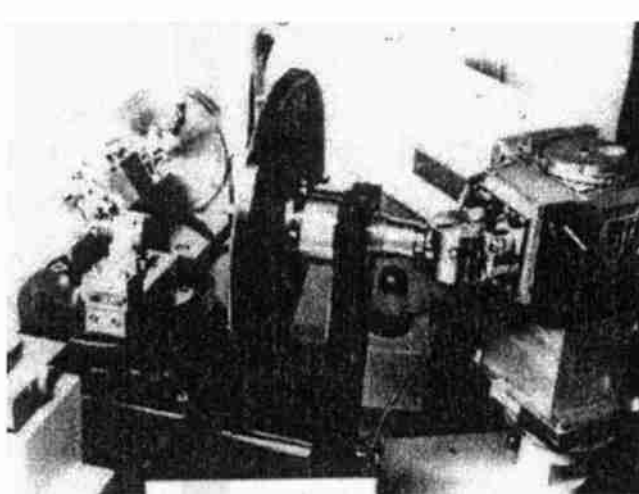


图 10 样品表层应力与应变状态
Fig. 10 Stress and strain states on the surface of specimen



(a) 开放式 Eulerian 摇臂
(a) Open Eulerian cradle



(b) 面积检测器
(b) Area detector

图 11 X 射线衍射装置
Fig. 11 X-ray diffraction systems

(以 ϕ 与试样表面法向方向夹角表示 ϕ 的方位),按弹性力学原理,有

$$= \frac{1+\nu}{E} \sigma_\phi \sin^2 \psi - \frac{\nu}{E} (\sigma_1 + \sigma_2) \quad (15)$$

此式中 ϕ 的方向是在物体表面上的投影方向。可由以其方向为法线方向的 (hkl) 面的面间距的变化表征,即有

$$= \frac{d - d_0}{d_0} \quad (16)$$

式中 d 为有应力时以 ϕ 方向为法线方向的 (hkl) 晶面间距; d_0 为无应力时 (hkl) 晶面间距。

由方程(14)、(15)和(16)可得到

$$\sigma_\phi = - \frac{E}{2(1+\nu)} \cot^2 \psi_0 \frac{\partial(2 - \sin^2 \psi)}{\partial \sin^2 \psi} = KM \quad (17)$$

式中 $K = - \frac{E}{2(1+\nu)} \cot^2 \psi_0$ 为应力常数, $M = \frac{\partial(2 - \sin^2 \psi)}{\partial \sin^2 \psi}$ 是 $2 - \sin^2 \psi$ 曲线的斜率。因此只需测定 $2 - \sin^2 \psi$ 曲线的斜率 M 就可得到 σ_ϕ 值。

图 11a、b 为 X 射线衍射装置^[14]。X 射线衍射法测定的残余应力为 X 射线光斑照射面积上的平均残余应力。由于 X 射线衍射法残余应力的测定,只需材料为结晶态,因此可检测的材料范围比基底曲率法要广泛得多。此外,对于 MEMS 器件 X 射线衍射法还可有效地测试不同材料组成的多层膜中各膜中残余应力的大小。

吴廷斌等^[15]采用 X 射线衍射法测定了 NiTi 薄膜中的平均残余应力与薄膜厚度的关系。表 1 列出了溅射温度为 823 K 时不同薄膜厚度中平均残余应力的测定结果。由表 1 可知, NiTi 薄膜中的平均残余应力均为拉应力。随薄膜厚度的增加,平均残余应力不断减小。NiTi 薄膜的制备过程也就是气相 Ni、Ti 原子在硅基底上沉积的过程。薄膜的生长过程主要有核生长

型、层生长型和层核生长型。在半导体表面上形成的金属薄膜通常呈层核生长型模型。晶格不匹配和热不匹配造成的应力主要是在基底与薄膜的界面附近区域中,因此在沉积过程中,靠近基底的薄膜粒子完成形核长大并形成几个原子层的连续膜层后,不匹配的影响逐渐减弱,而在这几个单原子层之上的成膜粒子便以层生长模式逐层继续生

表 1 NiTi 薄膜中不同膜厚下测定的残余应力
Tab.1 NiTi film stress vs. film deposition thickness

No.	膜厚/ μm	残余应力/MPa
1	2.4	0.337
2	5.0	0.215
3	6.45	0.069
4	8.0	0.138

长,其受热匹配及晶格不匹配的影响也就逐渐减小。所以,当薄膜沉积完成并经晶化退火后,应力在薄膜厚度方向上形成一个由界面向外表面逐渐减小的应力梯度。薄膜的厚度越大,其应力的平均值就越小。

Kusaka 等^[16]使用 X 射线衍射法研究了热处理工艺对 $\{111\}$ Al 薄膜中残余应力的影响。图 12 给出了不同温度退火和淬火工艺处理下薄膜中的残余应力大小。两种热处理工艺状态下 Al 薄膜中的残余应力均为拉应力。然而退火处理状态下的残余应力均大于淬火处理状态下的残余应力,而淬火处理下残余应力大小与淬火温度无关(其原因尚未清楚)。对于退火处理的 Al 薄膜,残余应力在 350 达最大值。当退火温度小于 350 时,随退火温度升高即 T 的增大,由公式(3)知,Al 薄膜中残余应力逐渐增大。当退火温度超过 350 后,由于薄膜中微孔开始长大,使薄膜中的残余应力得到部分释放。

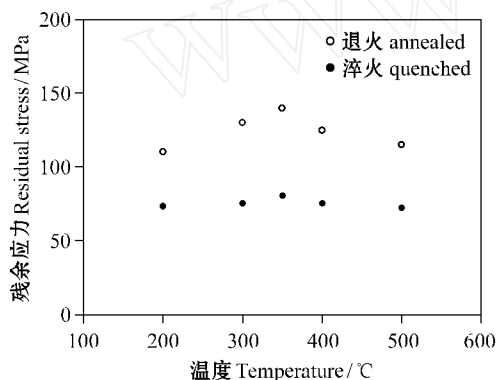


图 12 不同热处理状态下 Al 薄膜中的残余应力

Fig. 12 Residual stresses in Al films experiencing different heat treatment

Chollet 等^[17]用 X 射线法测定了基底为不同型号钢的 TiC 薄膜中的残余应力,发现基底成分和热处理状态对薄膜中的残余应力有影响(如表 2 所示)。表 2 中样品 1~3 为低合金钢基底;4~7 为高 Cr 合金钢基底;8~9 为高速钢基底。不同型号钢为基底的 TiC 薄膜中的残余应力均为压应力。对于沉积法得到的样品中(慢速冷却),低合金钢和高 Cr 合金钢为基底的 TiC 薄膜中的残余应力变化不大,而高速钢为基底的 TiC 薄膜中的残余应力明显较小。通过淬火处理后,对于基底为低合金钢和高速钢的样品,TiC 薄膜中的残余应力下降很大,对于基底为高 Cr 合金钢的 4、5、7 号样品,TiC 薄膜中的残余应力下降不明显,而 6 号样品中 TiC 薄膜中的残余应力经淬火后升高。大多数样品经

淬火处理后,TiC 薄膜中残余应力下降的原因是在较高冷速下基底发生了塑性变形,使部分应力得到释放。

表 2 基底为不同型号钢的 TiC 薄膜中残余应力

Tab.2 Residual stresses in TiC thin films with different types of steel substrate

样品	残余应力/MPa	
	沉积法得到的样品	淬火处理
1	-2 950	-1 559
2	-2 852	-974
3	-2 707	-1 453
4	-2 563	-2 266
5	-2 994	-2 653
6	-2 586	-3 116
7	-2 727	-2 360
8	-2 178	-1 643
9	-2 163	-1 538

4.3 薄膜残余应力的控制

MEMS 器件中残余应力的存在对其力学行为和电性能均有影响。为了提高 MEMS 器件的整体性能,就必然对其残余应力状态进行控制。从 4.1 和 4.2 小节知道,薄膜中残余应力状况受到制备工艺、热处理工艺及膜厚的影响。研究表明由于制备工艺、热处理工艺及膜厚不同,薄膜的生长过程不同,微结构不同,造成了薄膜中不同的残余应力状态。因此,可以通过薄膜的制备工艺(如温度)、热处理工艺及薄膜厚度的控制实现对残余应力的控制。

此外,还可通过对基底进行掺杂,改变薄膜与基底的表面电子密度差来控制薄膜中的应力。根据公式(4),因对于同一种薄膜材料 $(dp/dn)_1$ 为定值,所以薄膜应力正比于薄膜与基底的表面电子密度差。在对 CoSi_2 薄膜研究中发现,在重掺杂 B 的 P 型 Si 基底上形成的 CoSi_2 薄膜的应力低于低掺杂 B 的 Si 基底上 CoSi_2 薄膜的应力。这是因为 B 的表面电子密度高于 Si,高掺杂浓度 B 的加入降低了基底与薄膜间的表面电子密度差,从而降低了薄膜应力,文献[18]进行的实验较好地证实了这一点。

5 残余应力对微结构力学行为的影响

前面已经指出,制作 MEMS 器件常用的牺牲层工艺,不可避免地使沉积在基底上的薄膜产生残余应力。这种应力会对加工出来的微结构的力学行为产生重要影响。微梁结构是十分常用的 MEMS 典型结构,在其内部残余应力的作用下,会产生几类重要的力学行为:由于残余应力沿梁厚度方向的梯度分布,微梁会发生弯曲;对于固支的悬臂梁,大的压应力会导致结构的屈曲(图 13)^[19]。

粘附是微结构(例如微梁、板)在加工或者工作过程中比较常见的一种失效模式。图 14 显示了微悬臂梁结构粘附到基底上的情形。表面之间粘着力作用

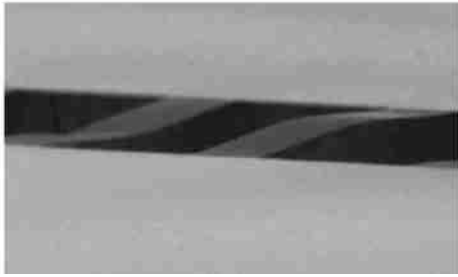


图 13 由于压应力而屈曲的微桥结构(两端固支梁)
Fig. 13 Buckling of microbridge by Compressive stress (doubly-clamped beam)

将产生粘附能,当粘着作用大于使微结构产生变形的弹性恢复力时,将发生粘附。文献[20]引入无量纲的剥离数(peel number)作为微结构发生粘附失效的一个重要判据。对于许多结构,残余应力会影响剥离数。5.3 节将详细讨论残余应力对微结构粘附行为的影响。

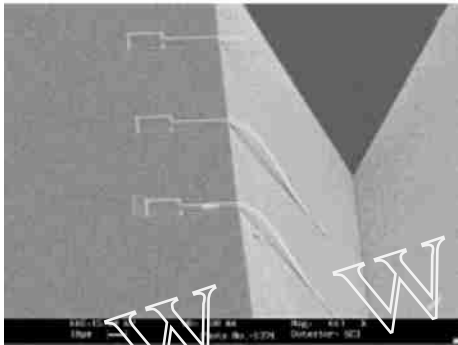


图 14 粘附到基底上的悬臂梁结构
Fig. 14 Microcantilever adhering to substrate

谐振器广泛应用于 MEMS 传感器(例如加速度计)的制作,响应频率是它的一个重要参数。谐振器中如图 15 的梳齿结构,在外界激励作用下会产生响应。图中的各齿实际上是一个个悬臂梁,其内部的残余应力会影响结构的响应频率。5.4 节将讨论残余应力对横向谐振器响应频率的影响。

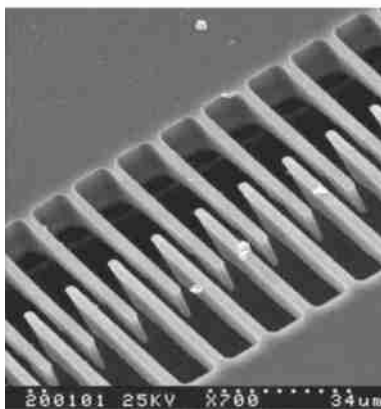


图 15 梳齿部分的 SEM 照片
Fig. 15 SEM of comb structure

5.1 残余应力的梯度分布使微悬臂梁弯曲

以图 5b 所示的压应力为例,为平衡图中所示的应

力梯度分布,相当于外部作用图 16 所给的弯矩,其结果使微悬臂梁(弹性模量为 E)向上弯曲。

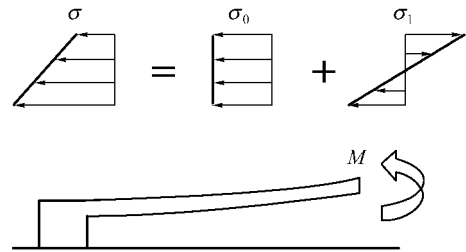


图 16 由于压应力而向上弯曲的微悬臂梁
Fig. 16 Curved-up of microcantilever by compressive stress

$$\text{设应力的梯度分布为} \quad \sigma = \sigma_0 - \frac{1}{(t/2)} z \quad (18)$$

$$\text{应力对应的弯矩为} \quad M = \int_{-t/2}^{t/2} Wz \, dz \quad (19)$$

将式(18)代入式(19),计算出

$$M = -\frac{1}{6} Wt^2 \sigma_0 \quad (20)$$

如果忽略横向泊松比的影响,可以导出微梁弯曲

$$\text{的曲率半径} \quad R = -\frac{1}{12} \frac{EWt^3}{M} \quad (21)$$

$$\text{把式(21)给出的弯矩代入,得到} \quad R = \frac{1}{2} \frac{Et}{\sigma_0} \quad (22)$$

如果考虑泊松比对横向的影响,微梁弯曲的曲率

$$\text{半径为} \quad R = \frac{1}{2} \left[\frac{E}{1-\nu} \right] \frac{t}{\sigma_0} \quad (23)$$

5.2 残余压应力使微梁屈曲

有厚度为 h 、横截面积为 A 的矩形截面梁,其截面的惯性矩 $I = (1/12) Ah^2$ 。假设梁的任一截面都承受着轴向力 P , P 的大小不变且均匀分布。 P 与一个外部的横向均布荷载 $q(x)$ 共同作用,使得微梁各部分发生位移 w ,如果微梁所用材料的密度为 ρ ,弹性模量为 E ,并且材料是各向同性的,那么梁发生弯曲的微分方程为^[21]

$$EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + P \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + A \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} = -q(x) \quad (24)$$

这里考虑的是微梁在其内部应力作用下发生的屈曲, $q(x)$ 为零。当 P 足够大时梁失稳。假设位移 $w(x, t)$ 可被分离变量表示为 $X(x)$ 、 $T(t)$, 则式(24)变为

$$\frac{1}{T} \frac{d^2 T}{dt^2} = -\frac{EI}{A} \frac{1}{X} \frac{d^4 X}{dx^4} - \frac{P}{A} \frac{1}{X} \frac{d^2 X}{dx^2} = -\omega^2 \quad (25)$$

为梁的频率,式(25)的解为

$$T(t) = C_1 \cos(\omega t + \phi) \quad (26a)$$

$$X(x) = C_2 \sinh \frac{\alpha x}{L} + C_3 \cosh \frac{\alpha x}{L} + C_4 \sin \frac{\beta x}{L} + C_5 \cos \frac{\beta x}{L} \quad (26b)$$

$$\text{其中} \quad \omega^2 = -\frac{PL^2}{2EI} + \left[\left(\frac{PL^2}{2EI} \right)^2 + \frac{AL^4}{EI} \right]^{1/2} \quad (27a)$$

$$b^2 = a^2 + \frac{PL^2}{EI} \quad (27b)$$

L 为梁的长度。对于两端简支的梁和两端固支的梁,其边界条件分别为式(28)和式(29)

$$\frac{d^2 X}{dx^2} \Big|_{x=0} = \frac{d^2 X}{dx^2} \Big|_{x=L} = 0 \quad (28)$$

$$\frac{dX}{dx} \Big|_{x=0} = \frac{dX}{dx} \Big|_{x=L} = 0 \quad (29)$$

另外,两种情况都应满足 $w(0) = w(L) = 0$,将边界条件代入式(26a)、(26b),可解出位移表达式,结构发生屈曲的临界荷载为

$$P = - \frac{2}{L^2} EI/L^2 \quad \text{两端简支梁} \quad (30)$$

$$P = - \frac{4}{L^2} EI/L^2 \quad \text{两端固支梁} \quad (31)$$

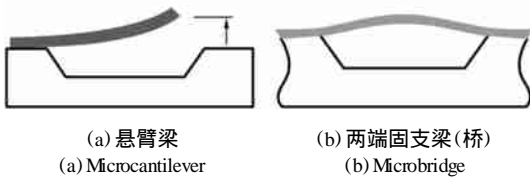


图 17 由于压应力而屈曲的微梁结构
Fig. 17 Buckling of microstructure by compressive stress

进一步得到使结构发生屈曲的临界残余应力为

$$\sigma_{Euler} = \frac{P}{A} = - \frac{2}{12L^2} Eh^2 \quad \text{两端简支梁} \quad (32)$$

$$\sigma_{Euler} = \frac{P}{A} = - \frac{2}{3L^2} Eh^2 \quad \text{两端固支梁} \quad (33)$$

5.3 残余应力对粘附的影响

C. M. Mastrangelo 等^[20]在讨论微结构中的粘附现象时,引入了无量纲数——剥离数 (peel number),对于图 18 所示的粘附情形

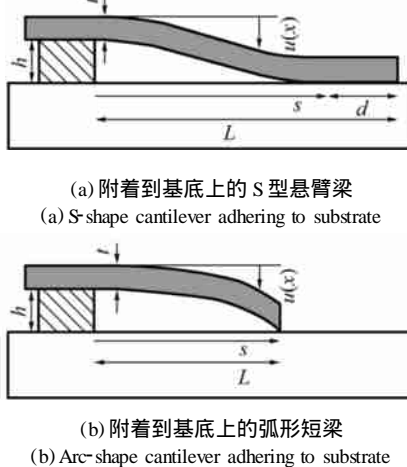


图 18 微梁结构发生粘附的两种情形
Fig. 18 Microcantilever adhering to substrate in two cases

定义
$$N_p = 3 Et^3 h^2 / 2 s^4 \quad (34)$$

s 为界面粘附能。剥离数的物理意义为微悬臂梁的挠曲弹性能与粘附能的比值,当 $N_p > 1$ 时,弹性能大于粘附能,微梁与基底产生剥离; $N_p < 1$ 时,弹性能小于粘附能,微梁与基底产生粘附。文献[20]给出了多种微结构的剥离数

$$N_p = \frac{3 Et^3 h^2}{2 s^4} \quad \text{(长悬臂梁)} \quad (35a)$$

$$N_p = \frac{3 Et^3 h^2}{8 s^4} \quad \text{(短悬臂梁)} \quad (35b)$$

$$N_p = \frac{128 Et^3 h^2}{5 L^4} \left[1 + \frac{4}{21} \frac{R L^2}{Et^2} + \frac{256}{2 \cdot 205} \left(\frac{h}{t} \right)^2 \right] \quad \text{(两端固支梁)} \quad (35c)$$

$$N_p = \frac{186 Et^3 h^2}{(1 - \nu^2) w^4} \left[1 + \frac{27(1 - \nu^2)}{310} \frac{R w^2}{Et^2} + \frac{12}{31} \left(\frac{h}{t} \right)^2 \right] \quad \text{(宽度为 } w \text{ 的方板)} \quad (35d)$$

$$N_p = \frac{40 Et^3 h^2}{3(1 - \nu^2) R_p^4} \left[1 + \frac{51(1 - \nu^2)}{160} \frac{R R_p^2}{Et^2} \right] \quad \text{(周边固定的圆板)} \quad (35e)$$

其中后三式的 R 为结构中的残余应力。通常利用式(35a)~(35e)反解出梁长 L 或圆板半径 R_p ,得到如果不产生粘附时的结构几何参数。文献[22]将剥离数推广到粗糙面接触的情形。在设计 MEMS 结构时,应注意考虑残余应力对粘附行为的影响。

5.4 残余应力对谐振结构响应频率的影响

对于如图 19 所示的横向谐振器结构来说,文献[23]应用 Rayleigh 公式给出了它的响应频率

$$f_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{4 EW^3}{ML^3} + \frac{24}{5} \frac{tW}{ML}} \quad (36)$$

式中 E 为弹性模量, L 、 W 、 t 分别为弯曲结构件长度、宽度和厚度, M 为悬臂梁质量。通过公式(36)可以估计出残余应力 R 对响应频率的影响。对于典型的弯曲结构件尺寸 $L = 150 \mu\text{m}$, $W = t = 2 \mu\text{m}$, 一个较小的残余拉应力使得响应频率在 $10 \sim 100 \text{ kHz}$ 范围内变化^[24]。

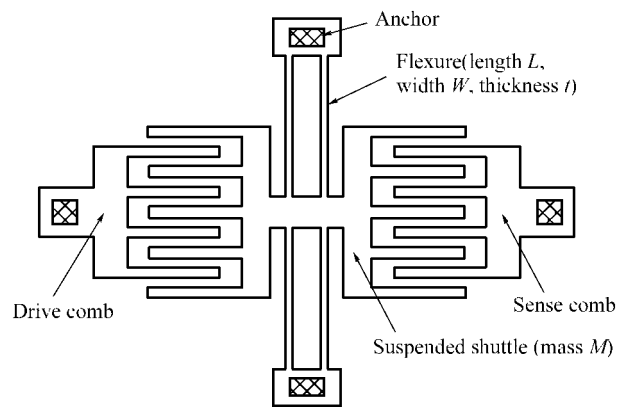


图 19 横向谐振器示意图
Fig. 19 Layout of a lateral resonator with straight flexures

如果结构的残余应力小到可以忽略,式(36)化为

$$f_0 \propto (W/L)^{3/2} \quad (37)$$

如果结构的残余应力足够大,式(36)化为

$$f_0 \propto (W/L)^{1/2} \quad (38)$$

可见,结构的 W/L (宽长比) 值一定程度上决定了其响应频率,而残余应力的大小会影响结构的响应频率对

宽长比的依赖关系^[24]。

6 总结

综上所述, MEMS 器件中(如薄膜材料)残余应力的存在严重影响了 MEMS 器件的成品率和可靠性。如果薄膜内存在较大的残余拉应力,将会导致薄膜破裂;如果薄膜内存在较大的残余压应力,将会使薄膜发生屈曲。残余应力还会影响器件的很多力学行为,例如粘附和振动,这在设计结构时是应该着重考虑的。MEMS 器件中残余应力的存在是由其加工过程决定的,淀积、退火和牺牲层工艺注定了残余应力是不可避免的,但通过对加工过程中温度、薄膜淀积厚度的控制和通过对基底的掺杂等手段,可有效地控制残余应力。残余应力的计算和实验测量是研究残余应力问题的重要工具,理论和实验方法都需要进一步的完善和改善。

References

- Zhao Y P. Some problems in mechanics of intelligent microsystems. Journal of Shijiazhuang Railway Institute, 1999, 12(2): 13~18 (In Chinese) (赵亚溥. 智能微系统力学中的几个问题. 石家庄铁道学院学报, 1999, 12(2): 13~18).
- Spearing S M. Materials issues in microelectromechanical systems (MEMS). Acta Mater, 2000, 48: 179~196.
- Hass G, Thun T E. Physics of thin films. New York: Academic Press, 1966.
- Pauleau Y. Generation and evolution of residual stresses in physical vapour deposited thin films. Vacuum, 2001, 61: 175~181.
- Cheng K J, Cheng S Y. Analysis and computation of the internal stress in thin films. Progress in Natural Science, 1998, 8(6): 679~689.
- Stoney G G. The tension of metallic films deposited by electrolysis. London: Proc. Roy. Soc. 1909, 9: 172.
- Freund L B. Substrate curvature due to thin films mismatch strain in the nonlinear deformation range. Journal of the Mechanical and Physics of Solids, 2000, 48: 1159~1174.
- Ohring M. The material science of thin films. San Diego: Academic Press, 1992.
- Freund L B, Floro J A, Chason E. Extensions of the stoney formula for substrate curvature to configurations with thin substrates or large deformations. Applied Physics Letters, 1999, 74(14): 1987~1989.
- Zhang X, Zhang T Y, Zohar Y. Measurements of residual stresses in thin films using micro-rotating structures. Thin Solid Films, 1998, 335: 97~105.
- Kuo C T, Lin C R, Lien H M. Origins of the residual stress in CVD diamond films. Thin Solid Films, 1996, 290~291: 254~259.
- Krulevitch P, Johnson G C, Howe R T. Stress and microstructure in LPCVD polycrystalline silicon films: experimental results and closed form modeling of stresses. Mat. Res. Soc. Symp. Proc, 1992, 239: 13~18.
- Bunshah R F. Handbook of hard coatings: deposition technologies, properties and applications. Norwich, New York, U. S. A.: Noyes Publications/William Andrew Publishing, LLC, 2001.
- Kämpfe B. Investigation of residual stresses in microsystems using X-ray diffraction. Mater. Sci. Eng, 2000, 288A: 119~125.
- Wu T B, Qi X, Wang W J, et al. Residual stress study of NiTi shape memory alloy thin films. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2001, 35(3): 436~439 (In Chinese) (吴廷斌, 漆 灏, 王文杰等. NiTi 形状记忆合金薄膜的残余应力. 上海交通大学学报, 2001, 35(3): 436~439).
- Kusaka K, Hanabusa T, Nishida M, Inoko F. Residual stress and in-situ thermal stress measurement of aluminum film deposited on silicon wafer. Thin Solid Films, 1996, 290~291: 248~253.
- Chollet L, Boving H, Hintermann H E. Residual stress measurement of refractory coatings as a nondestructive evaluation. J. Mater. Energy Systems, 1985, 6: 293~299.
- Liu J F, Feng J Y, Zhu J. Micromechanism of intrinsic stress in CoSi₂ thin films. Progress in Natural Science, 2001, 11(2): 163~167 (In Chinese) (刘继峰, 冯嘉猷, 朱 静. CoSi₂ 薄膜内应力的微观机制研究. 自然科学进展, 2001, 11(2): 163~167).
- Senturia S D. Microsystem design. Boston, U. S. A.: Kluwer Academic Publishers, 2001.
- Mastrangelo C H, Hsu C H. Mechanical stability and adhesion of microstructure under capillary forces-part : experiments. Journal of Microelectromechanical Systems, 1993, 2: 44~55.
- Guckel H, Randazzo T, Burns D W. A simple technique for the determination of mechanical strain in thin films with application to polysilicon. J. Appl. Phys, 1985, 57(5): 1671~1675.
- Wang L S, Zhao Y P. The effect of surface roughness on the adhesion of microstructure. Journal of Tribology(Accepted) (In Chinese) (王立森, 赵亚溥. 表面粗糙度对于微结构粘附的影响分析. 摩擦学学报(已录用)).
- Howe R T. Resonant microsensors. Proc. 4th Int. Conf. Solid-state Sensors and Actuators (Transducers '87), Tokyo, Japan, June 2-5, 1987. 843~848.
- Bustillo J M, Howe R T, Muller R S. Surface micromachining for microelectromechanical systems. Proceedings of the IEEE, 1998, 86(8): 1552~1572.

作者简介

钱 劲,男,1978年10月生,江西省宜春市人,汉族。中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室(LNM)在读研究生,研究方向为微系统力学。E-mail:qianj@lnm.imech.ac.cn

刘 ,女,1972年9月生,北京市人,汉族。中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室(LNM)博士后,研究方向为薄膜材料的性能测试。

张大成,男,1961年4月生,北京市人,汉族。北京大学微电子学研究所副所长,教授。主要研究方向为 MEMS 技术和集成电路技术。

赵亚溥,男,1963年8月生,河北晋州人,汉族。现任中国科学院力学研究所研究员,博士生导师,非线性力学国家重点实验室(LNM)主任,理学博士。主要从事微系统力学和冲击动力学的研究。E-mail:yzhao@lnm.imech.ac.cn

ZHAO Yapu, male, born in Hebei Province in August 1963. Ph. D, he is now the director of LNM, Institute of Mechanics, CAS. His main research interests include mechanical issues in MEMS and impact dynamics.