

文章编号:1001-4888(2020)02-183-07

## 基于斜向背散射偏振拉曼光谱 的{100}c-Si 面内应力分析\*

孟田<sup>1</sup>, 柴俊杰<sup>1</sup>, 马路路<sup>1</sup>, 常颖<sup>1</sup>, 曲传咏<sup>1,2</sup>, 仇巍<sup>1,2</sup>

(1. 天津大学机械工程学院力学系, 天津 300072; 2. 天津市现代工程力学重点实验室, 天津 300072)

**摘要:** 复杂应力状态下应力分量的解耦分析对半导体的设计和制造具有重要意义。本文开展了方法学研究, 首先建立了{100}晶面族单晶硅面内应力分量解耦分析模型, 基于该模型, 通过改变入射光和散射光的几何构型和偏振构型, 可得到单晶硅拉曼频移与应力分量的解析关系。在此基础上, 提出了一种利用斜向背散射偏振拉曼光谱在不同倾角、偏振方向和样品旋转角度下开展原位拉曼探测实现应力分量解耦分析的实用技术。本文通过实验验证了该方法的可靠性和适用性。

**关键词:** {100}晶面族单晶硅; 斜向背散射; 显微拉曼光谱; 面内应力; 几何与偏振构型

**中图分类号:** O348.1

**文献标识码:** A

**DOI:** 10.7520/1001-4888-19-077

### 0 引言

采用实验的手段实现硅基半导体材料内部应力/应变状态的定量分析, 准确表征硅基半导体内部的应力状态, 既是半导体制造中的共性需求, 也是新型半导体器件研发中的关键环节<sup>[1-4]</sup>。显微拉曼光谱测量技术因其快速、无损、非接触、空间分辨率高等优点<sup>[5]</sup>, 成为了近年来发展起来的微纳尺度实验力学测量的有力工具, 并在微结构内应力表征<sup>[6-9]</sup>、微尺度界面力学分析<sup>[10-12]</sup>、低维纳米材料力学问题研究等领域获得了成功应用<sup>[13-16]</sup>。

拉曼力学测量中, 被测样品的应力状态是定量表征的关键环节。然而, 传统的测量方法所采用的表征模型均无法实现针对单晶硅材料面内应力分量的解耦, 仅能定量给出被测表面内的主应力和。在已有的单晶硅材料与器件拉曼应力表征的实验工作中, 大多数采用了替代或简化的测量方法。例如, Lee 等<sup>[17]</sup>基于简化的简单应力状态对(111)Si 衬底上外延生长的 3C-SiC 残余应力进行了表征; Miyatake 等<sup>[18]</sup>借助于有限元的手段对(110)单晶硅进行了分析研究; Ma 等<sup>[19]</sup>基于球扩展腔模型得到了(100)和(111)单晶硅压痕周边的残余应力分布情况。但是这些应力测量分析方法均未能从测量原理上实现应力分量的解耦。为此, 本团队前期开展了一系列方法学的基础研究<sup>[20-22]</sup>, 从测量模型层面对单晶硅材料的应力状态分量解耦分析进行了系统地讨论, 并提出了适用于单晶硅任意晶面的频移-应力通用模型。然而, 该通用模型在应用于传统的法向背散射拉曼光谱测量时, 由于频移-应力关系式当中两个应力分量对应相同的系数, 使其仍然难以适用于{100}晶面族 c-Si 面内应力状态解耦问题。因此, 本文在前期显微拉曼外光路子系统研究的基础上, 提出了斜向背散射偏振拉曼光谱探测方法, 并将其与单晶硅频移-应力通用模型相结合, 从测量原理层面实现了两向应力分量的解耦分析。

\* 收稿日期: 2019-05-06; 修回日期: 2019-06-14

基金项目: 国家自然科学基金(11827802, 11890682, 11772223)资助

通讯作者: 仇巍, 男, 博士, 教授。主要研究领域: 基于光谱技术的实验固体力学。Email: qiuwei@tju.edu.cn

## 1 材料与实验

本文围绕所提出应力分析方法开展的验证实验与应用实验,采用了上海大恒光学精密机械有限公司生产的{100}晶面族单晶硅样品,厚度 5mm,N 型掺杂,电阻率  $10\Omega \cdot \text{cm}$ 。经划片机(型号 UNIPOL-802)切割后沿[100]、[010]和[001]晶向的长度分别为  $10.00\text{mm} \times 5.00\text{mm} \times 4.28\text{mm}$ 。

本文提出的方法需采用斜向背散射偏振拉曼系统。图 1 给出了自搭建的斜入射背散射显微拉曼光谱系统的组装示意图,该系统光谱探测的核心部位为前期工作研发的显微拉曼外光路子系统(EOS-MRS),并设计研制了三维平移与探测倾角(如图 1 中的  $\beta$ )转动功能的光路调节装置(4D-OAD)以及三维平移加 X-Y 面内转动的四轴位移样品台(4D-stage)。与传统的法向背散射拉曼系统相比,该系统因为采用了独立的 EOS-MRS 并增加了 4D-OAD 与 4D-stage,能够在测点不变的情况下任意连续调节样品转角  $\alpha(0^\circ \sim 360^\circ)$ ,探测倾角  $\beta(0^\circ \sim 90^\circ)$ ,入射光与散射光偏振方向的投影夹角  $\gamma(0^\circ \sim 180^\circ)$  和  $\varphi(0^\circ \sim 180^\circ)$ 。系统采用的摄谱仪的光栅为  $1800 \text{ l/mm}$ ,使用 532nm DPSS 激光器,其最大输出功率为 100mW。光路采用 Thorlabs 笼式光机组件,并使用保偏单模光纤与多模光纤分别与激光器和摄谱仪连接。光路采用  $50\times$  (Mitutoyo, N. A. = 0.42) 显微镜头,经光路优化后光斑直径约  $5\mu\text{m}$ ,操作距离为 20.5mm。

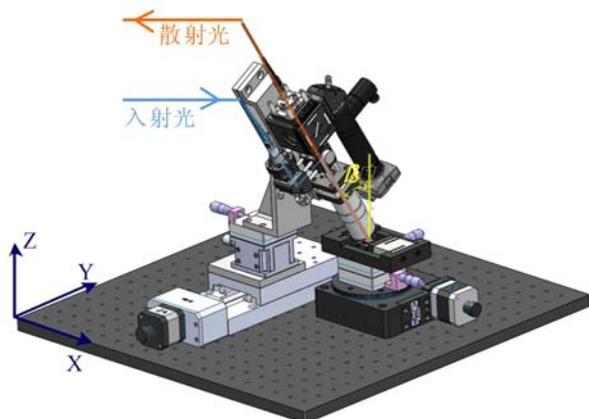


图 1 自搭建斜向背散射显微拉曼光谱仪

Fig. 1 Self-built oblique backscattering micro-Raman spectroscope (b)。在每个加载状态下,以垂直偏振状态(入射光偏振方向与 Y 轴平行,散射光检偏方向与 X 轴平行)对样品表面上同一测点重复 5 次拉曼测量,单次测量曝光时间为 3 秒。

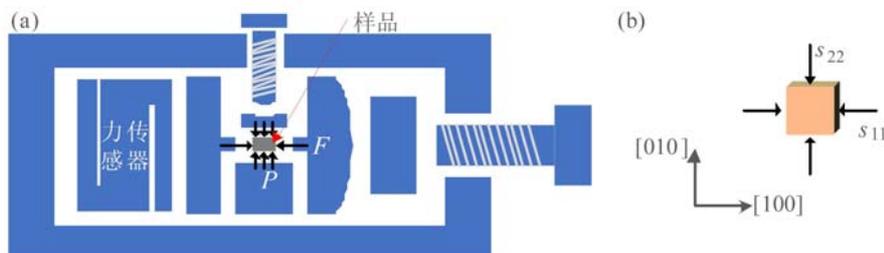


图 2 (a) 横向围压的单向压力加载装置示意图; (b) 样品的应力状态

Fig. 2 (a) Schematic diagram of unidirectional pressure loading device with lateral confining pressure; (b) Stress state of sample

## 2 实验表征模型

本文的实验表征模型是围绕斜向背散射偏振拉曼系统建立的。不失一般地,采用斜向背散射光路探测{100}晶面族单晶硅,其坐标系示意图如图 3 所示,[100]、[010]和[001]晶向构成晶体坐标系,测量

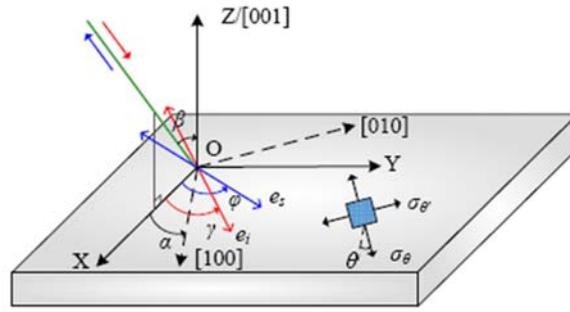


图 3 {100}单晶硅坐标系示意图

Fig. 3 Coordinate system of {100} monocrystalline silicon

坐标系 X-Y-Z 为笛卡尔坐标系,被测样品表面[100]晶向与 X 方向的夹角为  $\alpha$ ; Z 方向平行于被测样品表面外法向(即[001]晶向);被测样品表面处于图 3 所示的平面应力状态,  $\sigma_\theta$  和  $\sigma_{\theta'}$  ( $\sigma_\theta \geq \sigma_{\theta'}$ ) 是样品的主应力分量,主应力方向为  $\theta$  和  $\theta'$ ,且  $\theta' = \theta + 90^\circ$ 。在晶体坐标系中采用主应力  $\sigma_\theta$  和  $\sigma_{\theta'}$  表达的应力张量  $\sigma$  如式(1)所示:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{12} & \sigma_{22} \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_\theta & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\theta'} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1)$$

式中,  $\sigma_{11}$ 、 $\sigma_{22}$  是沿[100]晶向、[010]晶向的正应力分量;  $\sigma_{12}$  是沿[100]晶向的切应力分量。

$$\begin{cases} \sigma_{11} = \sigma_\theta \cos^2\theta + \sigma_{\theta'} \sin^2\theta \\ \sigma_{22} = \sigma_\theta \sin^2\theta + \sigma_{\theta'} \cos^2\theta \\ \sigma_{12} = \sin\theta \cos\theta (\sigma_\theta - \sigma_{\theta'}) \end{cases} \quad (2)$$

从而,根据式(2)可以得到如下关系式:

$$\begin{aligned} \sigma_{11} + \sigma_{22} &= \sigma_\theta + \sigma_{\theta'} \\ \sigma_{11} - \sigma_{22} &= (\sigma_\theta - \sigma_{\theta'}) \cos 2\theta \end{aligned} \quad (3)$$

基于广义胡克定律得到式(4)所示的应变-应力关系式:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{11} \\ \epsilon_{22} \\ \epsilon_{33} \\ 2\epsilon_{12} \\ 2\epsilon_{32} \\ 2\epsilon_{13} \end{bmatrix} = \mathbf{S}\sigma = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{12} & & & \\ & S_{12} & S_{11} & & & \\ & & & S_{44} & & \\ & & & & S_{44} & \\ & & & & & S_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ 0 \\ \sigma_{12} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}\sigma_{11} + S_{12}\sigma_{22} \\ S_{12}\sigma_{11} + S_{11}\sigma_{22} \\ S_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \\ S_{44}\sigma_{12} \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

式中,  $\epsilon_{uv}$  ( $u, v=1\sim 3$ ) 为应变张量的分量;  $S_{kl}$  ( $k, l=1\sim 3$ ) 为弹性系数张量分量。

将式(4)中的应变分量代入晶格动力学方程可得:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_{uv} K_{uv11} - \lambda & \epsilon_{uv} K_{uv12} & \epsilon_{uv} K_{uv31} \\ \epsilon_{uv} K_{uv21} & \epsilon_{uv} K_{uv22} - \lambda & \epsilon_{uv} K_{uv32} \\ \epsilon_{uv} K_{uv31} & \epsilon_{uv} K_{uv32} & \epsilon_{uv} K_{uv33} - \lambda \end{bmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{bmatrix} a - \lambda & c & 0 \\ c & b - \lambda & 0 \\ 0 & 0 & e - \lambda \end{bmatrix} = 0 \quad (5)$$

式中,  $a, b, c, e$  的表达式如式(6)所示,  $S_{11} = 7.68 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ ,  $S_{12} = -2.14 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ ,  $S_{44} = 12.6 \times 10^{-12} \text{ Pa}^{-1}$ ,  $p = -1.85\omega_0^2$ ,  $q = -2.31\omega_0^2$ ,  $r = -0.71\omega_0^2$ ,  $\omega_0 = 520.6 \text{ cm}^{-1}$ 。

$$\begin{cases} a = p(S_{11}\sigma_{11} + S_{12}\sigma_{22}) + q(S_{12}\sigma_{11} + S_{11}\sigma_{22}) + qS_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \\ b = q(S_{11}\sigma_{11} + S_{12}\sigma_{22}) + p(S_{12}\sigma_{11} + S_{11}\sigma_{22}) + qS_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \\ c = rS_{44}\sigma_{12} \\ e = q(S_{11}\sigma_{11} + S_{12}\sigma_{22}) + q(S_{12}\sigma_{11} + S_{11}\sigma_{22}) + pS_{12}(\sigma_{11} + \sigma_{22}) \end{cases} \quad (6)$$

通过对角化求解晶格动力学特征方程得到特征根  $\lambda_i$  和特征向量  $\mathbf{n}_i$ 。

$$\begin{cases} \lambda_1 = (a + b + \sqrt{(a-b)^2 + 4c^2})/2 & \mathbf{n}_1 = (1 \quad Q \quad 0) / \sqrt{Q^2 + 1} \\ \lambda_2 = (a + b - \sqrt{(a-b)^2 + 4c^2})/2 & \mathbf{n}_2 = (-Q \quad 1 \quad 0) / \sqrt{Q^2 + 1} \\ \lambda_3 = e & \mathbf{n}_3 = (0 \quad 0 \quad 1) \end{cases} \quad (7)$$

式中,  $Q$  的表达式如式(8)所示:

$$Q = \begin{cases} 0.5 \cot 2\theta - \sqrt{0.25 \cot^2 2\theta + 1}, & 0^\circ < \theta < 90^\circ \\ 0.5 \cot 2\theta + \sqrt{0.25 \cot^2 2\theta + 1}, & 90^\circ < \theta < 180^\circ \end{cases} \quad (8)$$

根据拉曼频移与特征值之间的关系  $\Delta\omega_i = \lambda_i / 2\omega_0$  得到晶体坐标系下拉曼应力关系表达式如下:

$$\begin{cases} \Delta\omega_1 = -1.711(\sigma_{11} + \sigma_{22}) + 0.587 \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (4\sigma_{12})^2} & \mathbf{n}_1 = (1 \quad Q \quad 0) / \sqrt{Q^2 + 1} \\ \Delta\omega_2 = -1.711(\sigma_{11} + \sigma_{22}) - 0.587 \sqrt{(\sigma_{11} - \sigma_{22})^2 + (4\sigma_{12})^2} & \mathbf{n}_2 = (-Q \quad 1 \quad 0) / \sqrt{Q^2 + 1} \\ \Delta\omega_3 = -2.298(\sigma_{11} + \sigma_{22}) & \mathbf{n}_3 = (0 \quad 0 \quad 1) \end{cases} \quad (9)$$

根据拉曼选择定则可知:

$$I = C \sum_m I_m = C \sum_m |e_i \cdot \mathbf{R}'_m \cdot e_s^T|^2, \quad m = 1, 2, 3$$

$$\mathbf{R}'_1 = \frac{d}{\sqrt{Q^2 + 1}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & Q \\ 0 & 0 & 1 \\ Q & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}'_2 = \frac{d}{\sqrt{Q^2 + 1}} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -Q \\ 1 & -Q & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{R}'_3 = d \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

式中,  $\mathbf{R}'_m$  为特征向量构成的坐标系下的拉曼张量。

在如图3所示的斜向背散射显微拉曼体系下,入射光与散射光的光矢量的表达式如式(11)所示:

$$A_i = \sqrt{1 + \tan^2 \gamma + \tan^2 \beta}, \quad A_s = \sqrt{1 + \tan^2 \varphi + \tan^2 \beta}$$

$$e_i = \begin{bmatrix} \frac{\cos(\gamma - \alpha)}{A_i \cos \gamma} & \frac{\sin(\gamma - \alpha)}{A_i \cos \gamma} & \frac{\tan \beta}{A_i} \end{bmatrix}, \quad e_s = \begin{bmatrix} \frac{\cos(\varphi - \alpha)}{A_s \cos \varphi} & \frac{\sin(\varphi - \alpha)}{A_s \cos \varphi} & \frac{\tan \beta}{A_s} \end{bmatrix} \quad (11)$$

将式(11)代入式(10)得到拉曼测量的频移增量  $\Delta\omega_{obs}$  可表示如下:

$$\Delta\omega_{obs} = \frac{I_i}{\sum_{j=1}^3 I_j} \Delta\omega_i = K(\sigma_\theta + \sigma_{\theta'}) + T(\sigma_\theta - \sigma_{\theta'})$$

$$\begin{cases} K = \frac{-1.711 \tan^2 \beta [1 + \cos 2\varphi + \cos 2\gamma + \cos^2(\varphi - \gamma)] - 2.298 \sin^2(\gamma + \varphi - 2\alpha)}{\tan^2 \beta [1 + \cos 2\varphi + \cos 2\gamma + \cos^2(\varphi - \gamma)] + \sin^2(\gamma + \varphi - 2\alpha)} \\ T = -0.587 \frac{\cos 2(\varphi - \alpha) + \cos 2(\gamma - \alpha) + \cos 2(\gamma + \varphi - \alpha) + \cos 2\alpha \cos^2(\varphi - \gamma)}{1 + \cos 2\varphi + \cos 2\gamma + \cos^2(\varphi - \gamma) + \sin^2(\gamma + \varphi - 2\alpha) / \tan^2 \beta} \cos 2\theta \\ \quad \cdot 0.587 \frac{\sin 2(\varphi - \alpha) + \sin 2(\gamma - \alpha) + \sin 2(\gamma + \varphi - \alpha) - \sin 2\alpha \cos^2(\varphi - \gamma)}{1 + \cos 2\varphi + \cos 2\gamma + \cos^2(\varphi - \gamma) + \sin^2(\gamma + \varphi - 2\alpha) / \tan^2 \beta} 2 \sin 2\theta \end{cases} \quad (12)$$

式中,系数  $T$  的第二项正负号取决于  $\theta$  的取值范围,  $0^\circ < \theta < 90^\circ$  时为负,  $90^\circ < \theta < 180^\circ$  时为正。

由式(12)可见,通过调控测试系统的样品旋转角  $\alpha$ 、探测倾角  $\beta$ 、入射偏振  $\gamma$  ( $0^\circ \sim 180^\circ$ ) 和散射偏振  $\varphi$  得到不同角度组合下的频移增量,联立就能得出被测的主应力分量  $\sigma_\theta$  和  $\sigma_{\theta'}$ 。

### 3 实用测量方法

本文根据实际测量出发,提出了通过调控样品旋转角  $\alpha$  的实用测量方法。该方法基于拉曼系统的偏振角  $\gamma$ 、 $\varphi$ ,以及非零探测倾角  $\beta$  均固定并确定,在两个不同样品旋转角  $\alpha_1$  和  $\alpha_2$  下分别进行原位的背散射拉曼测量得到各自实测的频移增量  $\Delta\omega_{o1}$  和  $\Delta\omega_{o2}$ ,联立得出主应力分量:

$$\begin{cases} \sigma_\theta = \frac{(K_{\alpha_2} - T_{\alpha_2})\Delta\omega_{o1} - (K_{\alpha_1} - T_{\alpha_1})\Delta\omega_{o2}}{2(T_{\alpha_1}K_{\alpha_2} - K_{\alpha_1}T_{\alpha_2})} \\ \sigma_{\theta'} = \frac{(K_{\alpha_2} + T_{\alpha_2})\Delta\omega_{o1} - (K_{\alpha_1} + T_{\alpha_1})\Delta\omega_{o2}}{2(T_{\alpha_1}K_{\alpha_2} - K_{\alpha_1}T_{\alpha_2})} \end{cases} \quad (13)$$

若本文实验中  $\theta = 90^\circ$  (因为围压力绝对值小于主加载力且二者均为负),  $\alpha_1 = 0^\circ$ ,  $\alpha_2 = 90^\circ$ ,  $\beta = 30^\circ$ ,

$\gamma=90^\circ, \varphi=0^\circ$ , 则

$$\begin{cases} \Delta\omega_{\alpha_1} = -2.298\sigma_\theta - 2.004\sigma_{\theta'} \\ \Delta\omega_{\alpha_2} = -2.004\sigma_\theta - 2.298\sigma_{\theta'} \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} \sigma_\theta = -1.819\Delta\omega_{\alpha_1} + 1.587\Delta\omega_{\alpha_2} \\ \sigma_{\theta'} = 1.587\Delta\omega_{\alpha_1} - 1.819\Delta\omega_{\alpha_2} \end{cases} \quad (14)$$

依据图2所示, 在验证实验时, 围压方向上应变为零, 结合式(14)可以推导得出  $\partial\Delta\omega_{\alpha_1}/\partial\sigma_{\theta'}$  和  $\partial\Delta\omega_{\alpha_2}/\partial\sigma_{\theta'}$  的理论结果:

$$\begin{aligned} \epsilon_{22} &= S_{12}\sigma_{11} + S_{11}\sigma_{22} = 0 \\ &\Rightarrow \sigma_\theta = 0.279\sigma_{\theta'} \\ &\Rightarrow \partial\Delta\omega_{\alpha_1}/\partial\sigma_{\theta'} = -2.65, \quad \partial\Delta\omega_{\alpha_2}/\partial\sigma_{\theta'} = -2.86 \end{aligned} \quad (15)$$

使用上述两种方法对面内应力状态进行实验分析, 仅需要通过测量两个几何与偏振构型下的频移, 就能够快速简洁地将应力分量解耦出来。

#### 4 实验结果分析

图4是本文标定实验得到的不同载荷下的样品拉曼光谱结果, 图4(a)为  $\alpha_1=0^\circ$  的实验结果, 图4(b)为  $\alpha_2=90^\circ$  的结果。由图可见, 随着载荷的增加, 拉曼光谱中特征峰的峰位明显地向高波数方向变化。

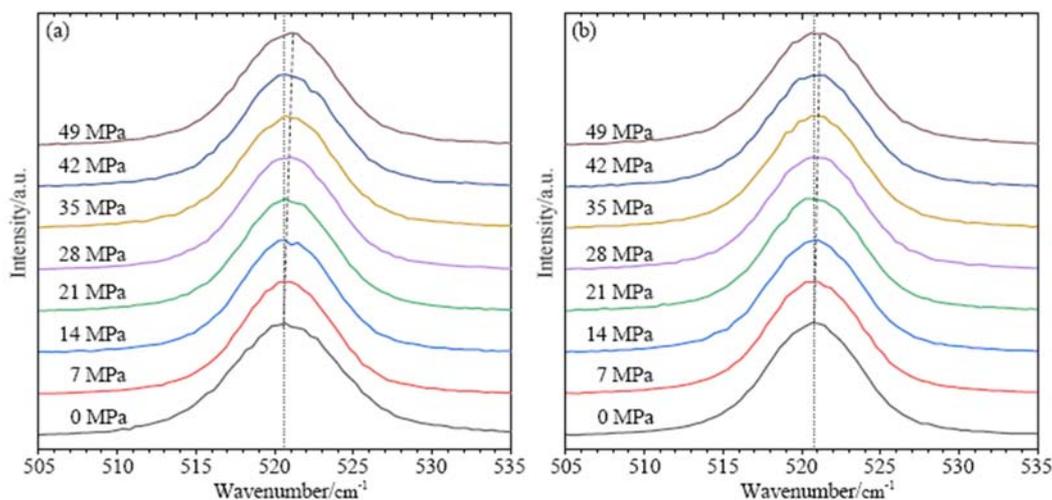


图4 验证实验中不同载荷的拉曼光谱: (a)  $\alpha_1=0^\circ$ ; (b)  $\alpha_2=90^\circ$

Fig. 4 Raman spectra under different loading in verification experiment: (a)  $\alpha_1=0^\circ$ ; (b)  $\alpha_2=90^\circ$

采用 Lorentz 函数对特征峰进行拟合, 得到各光谱数据的频移, 从而得出频移增量与应力关系如图5所示, 其中黑色数据点为实测数据, 红色直线为实测数据的线性拟合结果。图5(a)为  $\alpha_1=0^\circ$  的实验结果, 图5(b)为  $\alpha_2=90^\circ$  的结果, 拟合线的斜率分别为  $-2.97\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$  和  $-2.56\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ , 其对应的理论结果为  $-2.86\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$  和  $-2.65\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ 。根据图5可知该测量结果与理论结果非常吻合。需要说明的是, 图5给出的数据中, 每个载荷下测点数据的误差棒普遍较大, 这是加载装置、偏振控制、光谱测量与数据拟合等整个测量与分析体系中诸多环节上的误差累积、繁殖的结果, 可能对应力分析具有较大影响。因此, 在本文测量方法基础上配合基于多角度探测数据拟合逼近的分析技术, 能够有效减小包括拟合误差在内的各种误差因素对应力分析的影响。

本文应用实验分别采集了  $\alpha_1=0^\circ, \alpha_2=90^\circ$  和  $\alpha_3=180^\circ$  的拉曼光谱, 得到各自的频移增量  $\Delta\omega_0 = 0.419\text{cm}^{-1}, \Delta\omega_{90} = 0.403\text{cm}^{-1}, \Delta\omega_{180} = 0.420\text{cm}^{-1}$ 。将  $\Delta\omega_0$  和  $\Delta\omega_{90}$  代入式(15)得到  $\sigma_\theta = -0.067\text{GPa}, \sigma_{\theta'} = -0.123\text{GPa}$ ; 同理, 代入  $\Delta\omega_{90}$  和  $\Delta\omega_{180}$  得到:  $\sigma_\theta = -0.068\text{GPa}$  和  $\sigma_{\theta'} = -0.124\text{GPa}$ 。实验中样品实际加载  $F=2650\text{N}$ , 对应理论上  $\sigma_{\theta'}$  为  $-0.126\text{GPa}$ , 与实验结果相符; 而围压方向上的应力是未知待测的。可见, 本文应用实验验证了所提出的技术能够实现{100}c-Si表面两个主应力分量的解耦分析。

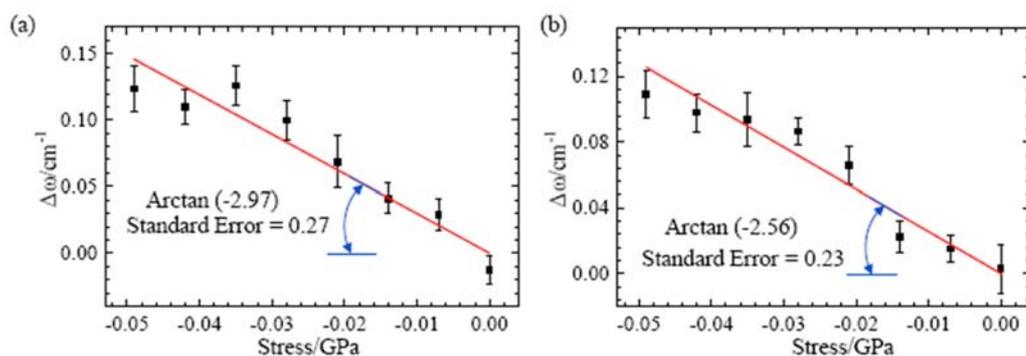


图5 验证实验得出的频移增量  $\Delta\omega$  与应力关系: (a)  $\alpha_1 = 0^\circ$ ; (b)  $\alpha_1 = 90^\circ$

Fig. 5  $\Delta\omega$ -stress relationship of verification experiment: (a)  $\alpha_1 = 0^\circ$ ; (b)  $\alpha_1 = 90^\circ$

## 5 结束语

本文首次使用微拉曼光谱对{100}单晶硅的面内应力进行了解耦分析。基于拉曼-力学分析和斜向背散射拉曼光谱仪的一般理论模型,建立了{100}单晶硅面内应力分量的解析关系。然后,提出了适用于双向应力状态解耦测量的实用方法。验证实验与应用实验进一步证明了理论模型的正确性和该工作中开发的测量方法的实用性,对于采用{100}单晶硅的微电子器件复杂应力分析具有适用性和有效性。

### 参考文献:

- [1] Jacobsen R S, Andersen K N, Borel P I, et al. Strained silicon as a new electro-optic material[J]. Nature, 2006, 441(7090):199-202.
- [2] Cazzanelli M, Bianco F, Borga E, et al. Second-harmonic generation in silicon waveguides strained by silicon nitride[J]. Nature Materials, 2012, 11(2):148-154.
- [3] Hsieh S H, Chen M J. A model for neutral defect limited electron mobility in strained-silicon inversion layers[J]. IEEE Journal of the Electron Devices Society, 2017, 5(2):101-106.
- [4] Kiefer W. Recent advances in linear and nonlinear Raman spectroscopy[J]. Journal of Raman Spectroscopy, 2007, 38(12):1538-1553.
- [5] Kosemura D, De Wolf I. Three-dimensional micro-Raman spectroscopy mapping of stress induced in Si by Cu-filled through-Si vias[J]. Applied Physics Letters, 2015, 106(19):191901.
- [6] Wen H, Borlaug D, Wang H, et al. Engineering strain in silicon using SIMOX 3-D sculpting[J]. IEEE Photonics Journal, 2016, 8(2):1-9.
- [7] Qiu W, Kang Y L, Li Q, et al. Experimental analysis for the effect of dynamic capillarity on stress transformation in porous silicon[J]. Applied Physics Letters, 2008, 92(4):041906.
- [8] Kang Y L, Qiu Y, Lei Z K, et al. An application of Raman spectroscopy on the measurement of residual stress in porous silicon[J]. Optics and Lasers in Engineering, 2005, 43(8):847-855.
- [9] Qiu W, Cheng C L, Liang R R, et al. Measurement of residual stress in a multi-layer semiconductor heterostructure by micro-Raman spectroscopy[J]. Acta Mechanica Sinica, 2016, 32(5):805-812.
- [10] Gong L, Kinloch I A, Young R J, et al. Interfacial stress transfer in a graphene monolayer nanocomposite[J]. Advanced Materials, 2010, 22(24):2694-2697.
- [11] Lei Z K, Qiu W, Kang Y L, et al. Stress transfer of single fiber/microdroplet tensile test studied by micro-Raman spectroscopy[J]. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 2008, 39(1):113-118.
- [12] Young R J, Gong L, Kinloch I A, et al. Strain mapping in a graphene monolayer nanocomposite[J]. ACS Nano, 2011, 5(4):3079-3084.
- [13] 仇巍, 张启鹏, 李秋, 等. 单层单晶石墨烯与柔性基底界面性能的实验研究[J]. 物理学报, 2017, 16(66):166801 (QIU Wei, ZHANG Qipeng, LI Qiu, et al. Experimental study on interfacial mechanical behavior of single-layer monocrystalline graphene on a stretchable substrate[J]. Acta Physica Sinica, 2017, 16(66):166801)

(in Chinese))

- [14] Xu C C, Xue T, Qiu W, et al. Size effect of the interfacial mechanical behavior of graphene on a stretchable substrate[J]. *ACS Applied Materials and Interfaces*, 2016, 8(40):27099–27106.
- [15] Qiu W, Li Q, Lei Z K, et al. The use of a carbon nanotube sensor for measuring strain by micro-Raman spectroscopy[J]. *Carbon*, 2013, 53:161–168.
- [16] Feng X Q, Xia R, Li X, et al. Surface effects on the elastic modulus of nanoporous materials[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, 94(1):011916.
- [17] Lee C J, Pezzotti G, Okui Y, et al. Raman microprobe mapping of residual microstresses in 3C-SiC film epitaxial lateral grown on patterned Si (111)[J]. *Applied Surface Science*, 2004, 228(1-4):10–16.
- [18] Miyatake T, Pezzotti G. Tensor-resolved stress analysis in silicon MEMS device by polarized Raman spectroscopy [J]. *Physica Status Solidi (a)*, 2011, 208(5):1151–1158.
- [19] Ma L L, Xing H D, Ding Q, et al. Analysis of residual stress around a Berkovich nano-indentation by micro-Raman spectroscopy[J]. *AIP Advances*, 2019, 9(1):015010.
- [20] Ma L L, Xing H D, Li Q, et al. Raman stress measurement of crystalline silicon desensitizes shear stress: only on  $\{001\}$  crystal plane[J]. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2018, 57(8):080307.
- [21] Qiu W, Ma L L, Xing H D, et al. Spectral characteristics of (111) silicon with Raman selections under different states of stress[J]. *AIP Advances*, 2017, 7(7):075002.
- [22] Qiu W, Ma L L, Li Q, et al. A general metrology of stress on crystalline silicon with random crystal plane by using micro-Raman spectroscopy[J]. *Acta Mechanica Sinica*, 2018, 34(6):1095–1107.

## In-plane stress analysis of $\{100\}$ c-Si by oblique backscattering polarized Micro-Raman spectroscopy

MENG Tian<sup>1</sup>, CHAI Jun-jie<sup>1</sup>, MA Lu-lu<sup>1</sup>, CHANG Ying<sup>1</sup>, QU Chuan-yong<sup>1,2</sup>, QIU Wei<sup>1,2</sup>

(1. Department of Mechanical, School of the Mechanical Engineering, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

2. Tianjin Key Laboratory of Modern Engineering Mechanics, Tianjin 300072, China)

**Abstract:** The decoupling analysis of stress components under complex stress state is of great importance for the semiconductor design and manufacture. This paper presents an investigation of methodology by establishing a decoupling model of in-plane stress for monocrystalline silicon with  $\{100\}$  plane. Based on the decoupling model, the analytical relationship between Raman-shifts of monocrystalline silicon and stress components is obtained by changing the geometry and polarization configurations of incident and scattered lights. Moreover, a practicable technique decoupling stress components is proposed, by which Raman data are in-situ detected by an oblique backscattering polarized Raman spectroscopy at different inclination angles, polarization directions and sample rotation angles, respectively. In conclusion, the reliability and the applicability of proposed method are verified by experiments in this work.

**Keywords:**  $\{100\}$  c-Si; oblique backscattering; Micro-Raman spectroscopy; in-plane stress; geometry and polarization configuration