

ЭЛЛИПСОМЕТРИЯ КРЕМНИЕВОЙ ПОДЛОЖКИ С ЕСТЕСТВЕННЫМ ПОВЕРХНОСТНЫМ СЛОЕМ

Определены оптические характеристики естественного поверхностного слоя на кремниевой подложке методами многоугловой и спектральной эллипсометрии. Для интерпретации экспериментальных данных использовались три модели функции показателя преломления $N(y)$: однородная подложка; однородный слой на однородной подложке; $N(y)$ в виде комбинации функций Ферми. Решение обратной задачи эллипсометрии градиентным методом показало, что исследуемому образцу соответствует третья модель. На основании полученных данных исследуется структура поверхностного слоя на подложке Si. Установлено, что данный слой является неоднородным, определена его толщина и произведена оценка состава слоя.

Поверхностный слой любого вещества в конденсированном состоянии, даже в отсутствие химически инородных примесей, имеет сложную физическую структуру [1]. Для полупроводниковых подложек структура этого слоя определяет эксплуатационные качества пленочных покрытий, используемых в электронных и оптоэлектронных устройствах. Поэтому отыскание физической модели адекватной поверхностному слою представляет актуальную задачу.

Одним из эффективных методов исследования оптических свойств приповерхностных слоев вещества является отражательная эллипсометрия [1]. Ее основное уравнение

$$\operatorname{tg} \Psi_e \cdot \exp(i\Delta_e) = \frac{R_p}{R_s} \quad (1)$$

содержит в левой части измеряемые поляризационные углы Δ_0 и Ψ_0 , а в правой – амплитудные коэффициенты отражения р- и s-поляризованного излучения R_p и R_s , которые определяются пространственным распределением комплексного показателя преломления $N(y) = n(y) - ik(y)$. Различают прямую задачу эллипсометрии (ПЗЭ), когда по заданной модели $N(y)$ рассчитываются ожидаемые углы Δ и Ψ , и обратную задачу эллипсометрии (ОЗЭ), когда по измеренным углам Δ_0 и Ψ_0 находят функцию $N(y)$. Некорректная ОЗЭ разрешима только при условии удачного выбора модели $N(y)$, содержащей небольшое число варьируемых параметров.

В данной работе метод эллипсометрии применен к определению характеристик естественного поверхностного слоя на кремниевой подложке (образец КЭС 0,01 Ом·см, кристаллографическая ориентация [111]). Мы обработали экспериментальные данные, полученные с помощью многоугольного эллипсометра ЛЭФ-2 на длине волны излучения $\lambda = 632,8$ нм. Для интерпретации наблюдаемых зависимостей $\Delta_0(\varphi)$ и $\Psi_0(\varphi)$ (φ – угол падения излучения) использовались три модели функции $N(y)$:

I. $N(y) = N_s$ (однородная подложка);

II. $N(y) = N_f$ ($-d < y < 0$), $N(y) = N_s$ ($y < -d$) (однородный слой на однородной подложке);

III. $N(y)$ в виде комбинации функций Ферми [3].

Решение ОЗЭ градиентным методом [3] для моделей I и II дало $N_s = 3,8 - i0,14$ и $N_f = 1,359 - i0,173$, $N_s = 3,833 - i0,017$ соответственно. В рамках модели III восстановлена зависимость $N(y)$, представленная на рис. 1. Здесь $N(y) = N_s = 3,822 - i0,034$ при $y < -2$ нм; в области y от $-1,7$ нм до -2 нм имеется промежуточная фаза или переходная зона (в частности, $N(-1,85 \text{ нм}) = 4,082 - i0,075$) в области $-1,7 \text{ нм} < y < 0$ находится однородный поверхностный слой с $N(y) = 1,347 - i0,122$.

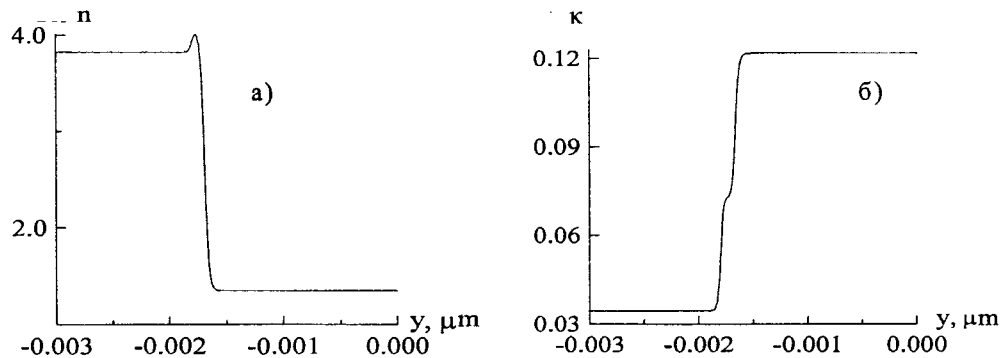


Рис. 1. Восстановленные профили действительной (а) и мнимой (б) частей показателя преломления подложки S_1 с поверхностным слоем

Характерной особенностью данных моделей является их преемственность. Другими словами, существуют предельные параметры функции $N(y)$, при которых последующая модель трансформируется в предыдущие. Функционал невязки [3], определенный в области углов падения φ от 45° до 80° ($N=22$), уменьшается по мере усложнения оптической модели. В настоящей работе делается попытка интерпретации структуры кремниевой подложки с естественным поверхностным слоем.

С целью интерпретации полученных данных на рис. 2 выделены области возможных значений n и k для кремния, имеющего монокристаллическую (cSi ; $N_c = n_c - ik_c$), аморфную (αSi ; $N_\alpha = n_\alpha - ik_\alpha$) и поликристаллическую (pSi ; $N_p = n_p - ik_p$) структуры [4].

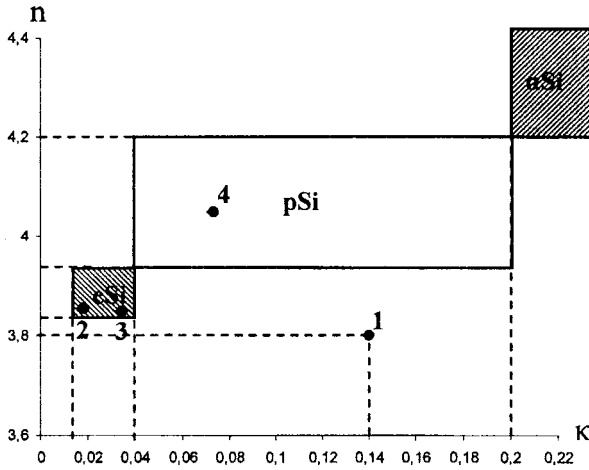


Рис. 2. Оптические характеристики кремниевых структур ($\lambda = 632,8$ нм)

Точка 1 на рис. 2 соответствует параметрам модели I. Видно, что полученный результат не может быть ассоциирован ни с одной из перечисленных структур. Значению N_s , найденному с использованием модели II соответствует точка 2 на рис. 2. Она удовлетворительно коррелирует с константами cSi . Однако указанное выше значение N_f существенно отличается от оптических констант известных кремниевых структур. В частности, данный поверхностный слой трудно отнести к оксидам кремния ($n \sim 1,46$, $k \sim 0$). В такой ситуации можно предположить, что значения N_f имеют смысл некоторых "эффективных" параметров, позволяющих учесть влияние поверхностного слоя на измеряемые эллипсометрические углы Δ_θ и Ψ_θ . Подобное было установлено и при определении оптических постоянных изотропных пленок полистирола методом НПО [6].

Значение N_s для модели III отмечено на рис. 2 точкой 3. Оно находится в области, соответствующей монокристаллическому кремнию. Согласно рис. 1, по мере приближения к поверхности образца ($y = 0$) показатели преломления и поглощения увеличиваются, достигая при $y = -1,85$ нм соответственно значений 4,082 и 0,075 (рис. 2, точка 4). По этим оптическим характеристикам кремний можно отнести к поликристаллическому. Таким образом, в рамках модели неоднородного слоя III промежуточную фазу (или контактную зону) толщиной 0,3 нм можно интерпретировать как фазу поликристаллический кремний, образовавшуюся благодаря взаимному проникновению монокремния и компонент поверхностного слоя. Это означает, что на кристаллической подложке Si имеется некоторый, как минимум, бинарный слой, который может состоять, например, из cSi , αSi , SiO_2 и т.д. Данные предположения находятся в согласии с соотношениями для молярной рефракции бинарных смесей [7], когда доли компонент и их показатели n и k определяют оптические характеристики смеси.

Подложка Si с естественным поверхностным слоем исследовалась нами также с помощью спектрального эллипсометра, описанного в [8]. Спектры поляризационных углов $\text{tg}\Psi_\theta$ и $\text{cos}\Delta_\theta$ (кривые 1 на рис. 3) измерялись от 500 нм до

900 нм при угле падения 700. Решения прямых и обратных задач спектральной эллипсометрии проводились по алгоритмам, описанным в [8, 9].

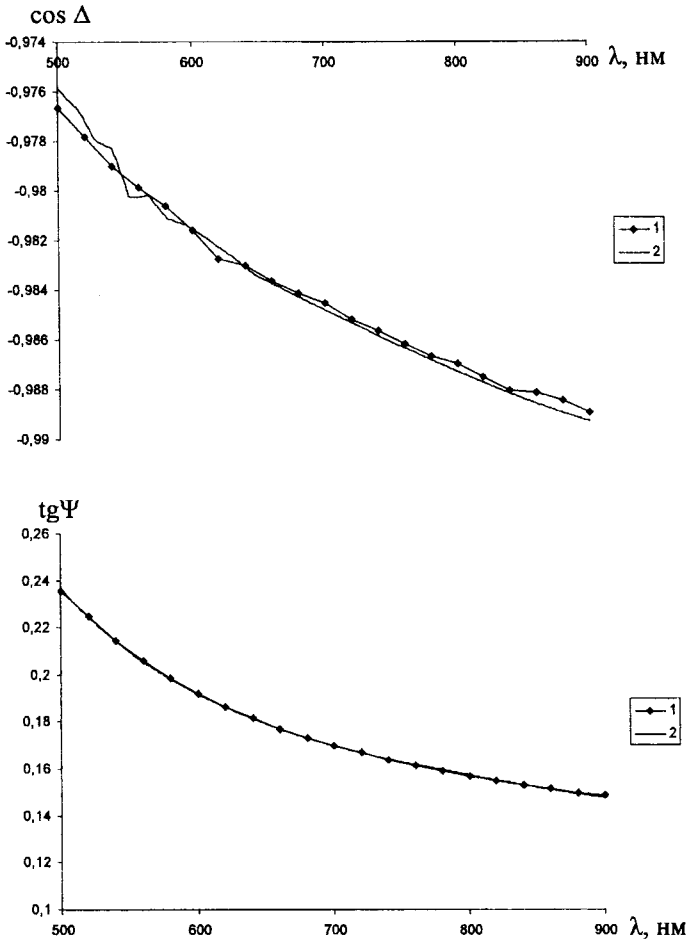


Рис. 3. Экспериментальные (1) и расчетные (2) модели подложка cSi – бинарный слой (0,8 α Si и 0,2 SiO_2) – слой SiO_2 – поверхностный слой спектры $\cos \Delta$ и $\text{tg} \Psi$

Оценить доли компонент и состав неоднородного поверхностного слоя удалось косвенно, используя априорную оценку его толщины (~ 2 нм). На рис. 3. приведены рассчитанные (кривые 2) спектры поляризационных углов для модели: подложка cSi – бинарный слой (80% α Si и 20% SiO_2) – слой SiO_2 – поверхностный слой. Удовлетворительная корреляция измеренных и рассчитанных кривых достигается при общей толщине неоднородного поверхностного слоя $\sim 3,2$ нм. При этом толщина бинарного слоя составляет 0,5 нм, слоя оксида кремния $\sim 1,7$ нм и поверхностного слоя, обладающего большим поглощением ~ 1 нм.

По данным многоугловой и спектральной эллипсометрии установлено, что кремниевая подложка КЭС 0,01 Ом·см с кристаллографической ориентацией [111] имеет кристаллическую структуру (cSi), неоднородный приповерхностный слой толщиной 2-3 нм с сильно поглощающей поверхностной пленкой.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Пшеницын, В.И.** Эллипсометрия в физико-химических исследованиях / В.И. Пшеницын, М.И. Абаев, Н.Ю. Лызлов. – Ленинград: Химия, 1986. – 152 с.
2. Решение обратной задачи эллипсометрии для слоя с изменяющимся по толщине комплексным показателем преломления / И.Н. Назаренко [и др.] // Вестник ВГУ. Серия химия, биология. – 2001. – № 1. – С. 164-169.
3. Оптические характеристики естественного поверхностного слоя на кремниевой подложке / Н.И. Стаськов [и др.] // Известия Гомельского государственного университета им. Ф. Скорины. – 2006. – Т. 2. – № 6(39). – С. 60-62.
4. **Ржанов, А.В.** Современные проблемы эллипсометрии / А.В. Ржанов. Новосибирск: Наука, 1980. – 192 с.
5. Влияние переходного слоя на результаты эллипсометрических исследований наноразмерных слоев / Д.И. Биленко [и др.] // ЖТФ. – 2005. – Т. 75. – Вып. 6. – С. 69-73.
6. К учету переходного слоя в методе НПВО / С.С. Гусев [и др.] // Оптика и спектроскопия. – 1980. – Т. 49. – Вып. 1. – С. 117-121.
7. **Горшков, М.М.** Эллипсометрия / М.М. Горшков. М.: Сов. Радио, 1974. – 200 с.
8. Применение спектральной эллипсометрии с бинарной модуляцией состояния поляризации для исследования ионоимплантированных структур / В.И. Ковалев [и др.] // Радиотехника и электроника. – 1999. – Т. 44. – С. 1059-1066.
9. Спектральная эллипсометрия многослойных гетероструктур ZnS/ZnSe / В.И. Ковалев [и др.] // ЖПС. – 2002. – Т. 69. – Вып. 2. – С. 258-263.