

**Н.И. Стаськов<sup>1</sup>, И.В. Ивашкевич<sup>1</sup>, Л.И. Сотская<sup>2</sup>, Т.Н. Ещик<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>УО «Могилевский государственный университет  
имени А.А. Кулешова», Могилев, Беларусь

<sup>2</sup>ГУ ВПО «Белорусско-российский университет», Могилев, Беларусь

<sup>3</sup>НТЦ БМС ОАО «Интеграл», Минск, Беларусь

## **СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНЫХ СЛОЕВ НА ТЕРМИЧЕСКИ ОБРАБОТАННЫХ КРЕМНИЕВЫХ ПЛАСТИНАХ**

### **Введение**

Для получения структур диоксид кремния-кремний ( $\text{SiO}_2\text{-cSi}$ ), необходимых для интегральной микроэлектроники, с заданными электрофизическими параметрами – малой величиной фиксированного заряда и низкой плотностью поверхностных состояний – используют термическое окисление пластин кремния. Реакция взаимодействия кислорода с кремнием протекает в переходном слое, который образуется между кремнием и растущим слоем стехиометрического диоксида [1]. Толщина переходного слоя зависят, главным образом, от времени окисления. Переходный слой между кристаллическим кремнием и стехиометрическим диоксидом, по-видимому, содержит разные кремниевые фазы. Поскольку окисление пластин кремния происходит благодаря диффузии кислорода через нарастающий слой  $\text{SiO}_2$ , то не исключается наличие пор. В связи с этим, интерес представляет модель переходного слоя, заполненного многокомпонентной эффективной средой с изотропными наноразмерными частицами кремниевых фаз и газообразных пор.

В данной работе предпринята попытка объединить модели эффективных сред Бруггемана и Максвелла-Гарнетта для нахождения диэлектрической проницаемости трехкомпонентных сред с целью определения вещественного состава переходных слоев в структурах SiO<sub>2</sub>-cSi методом многоугольной эллипсометрии.

## 1. Теория

В большинстве случаев при решении обратных оптических задач используются двухкомпонентные эффективные среды Лорентц-Лоренца, Максвелла-Гарнетта и Бруггеман. Если известны диэлектрические функции ( $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$ ) отдельных компонент, образующих, неоднородный слой, то  $\epsilon$  двухкомпонентной смеси веществ можно найти по выражению [2, 3]

$$\frac{\epsilon - \epsilon_{12}}{\epsilon + 2\epsilon_{12}} = f_1 \cdot \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{12}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_{12}} + f_2 \cdot \frac{\epsilon_2 - \epsilon_{12}}{\epsilon_2 + 2\epsilon_{12}}. \quad (1)$$

Объемные доли компонент должны удовлетворять условию  $f_1 + f_2 = 1$ . Параметр  $\epsilon_{12}$  в выражении (1) учитывает особенности конкретной модели. Формула для  $\epsilon$  сплошной среды Лорентц-Лоренца может быть получена из (1) при подстановке  $\epsilon_{12} = 1$ . При выборе модели Максвелла-Гарнетта необходимо приравнять  $\epsilon_{12} = \epsilon_1$  или  $\epsilon_{12} = \epsilon_2$ . Приближение эффективной среды по Бруггеману может быть получено путем приравнивания  $\epsilon_{12} = \epsilon$ . Если  $\epsilon_1$  относится к отдельным сферическим включениям, объемная часть которых невелика  $\left(f_1 < \frac{1}{3}\right)$ , а  $\epsilon_2$  – к компоненте, которая занимает оставшуюся часть объема (матрица), то для определения  $\epsilon$  эффективной среды используют формулу Максвелла-Гарнетта. При условии  $f_1 > \frac{2}{3}$ , среда с  $\epsilon_1$  становится матрицей, а среда с  $\epsilon_2$  – сферическими включениями. При  $\frac{1}{3} < f_1 < \frac{2}{3}$  понятие матрицы теряет смысл. Фактически, в эффективной среде существуют наночастицы с  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , не связанные друг с другом. Для такой эффективной среды с равноправными компонентами  $\epsilon_1$  и  $\epsilon_2$ , находящимися в среде с  $\epsilon$ , используется формула Бруггемана.

Предположим, что матричную среду Максвелла-Гарнетта с  $\epsilon_2$  заполнили эффективной средой Бруггемана, диэлектрическая проницаемость ( $\epsilon_{eff}$ ), которой находится по формуле

$$f_0 \cdot \frac{\epsilon_0 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_0 + 2\epsilon_{eff}} + f_1 \cdot \frac{\epsilon_1 - \epsilon_{eff}}{\epsilon_1 + 2\epsilon_{eff}} = 0. \quad (2)$$

Тогда, диэлектрическую проницаемость трехкомпонентной среды Максвелла-Гарнетта-Бруггеман, которая заполняет переходный слой, можно найти по формуле

$$\varepsilon_{01} = \varepsilon_2 \frac{\varepsilon_{eff} (1 + 2(f_0 + f_1)) + 2\varepsilon_2 (1 - (f_0 + f_1))}{\varepsilon_{eff} (1 - (f_0 + f_1)) + \varepsilon_2 (2 + (f_0 + f_1))}. \quad (3)$$

Компоненты среды характеризуются показателя преломления  $N_0 = \sqrt{\varepsilon_0}$ ,  $N_1 = \sqrt{\varepsilon_1}$  и  $N_2 = \sqrt{\varepsilon_2}$ . Соответствующие объемные доли компонент в слое –  $f_0$ ,  $f_1$  и  $f_2 = 1 - (f_0 + f_1)$ . Если  $f_0 = 0$  (или  $f_1 = 0$ ), то из выражения (2) находим  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_1$  (или  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_0$ ). В таком случае переходный слой оказывается двухкомпонентной средой с  $\varepsilon_{01}$ . Если  $f_0 = 1$  (или  $f_1 = 1$ ), то  $f_1 = 0$  (или  $f_0 = 0$ ) и  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_0$  (или  $\varepsilon_{eff} = \varepsilon_1$ ). В таком случае переходный слой оказывается однокомпонентным с  $\varepsilon_{01} = \varepsilon_0$  (или  $\varepsilon_{01} = \varepsilon_1$ ). Если  $f_0 = 0$  и  $f_1 = 0$ , то  $f_2 = 1$  и  $\varepsilon_{01} = \varepsilon_2$ . В этом случае слой заполнен средой с  $\varepsilon_2$ .

Для получения основного уравнения многоугольной эллипсометрии

$$\frac{r_p(\varphi)}{r_s(\varphi)} = \tan \psi(\varphi) e^{i\Delta(\varphi)}$$

в левую часть которого входят обобщенные амплитудные коэффициенты отражения  $r$  и  $s$  поляризованного света, мы использовали три электродинамические модели кремниевых структур:

I – однослойная (технологическая) модель с параметрами  $N_1$  и  $d_1$ ;

II – трехслойная модель, в которой слой с параметрами  $N_1$  и  $d_1$ , окружен переходными слоями с поляризуемостями  $\alpha_{01}$  и  $\alpha_{12}$ ;

III – трехслойная модель, в которой слой с параметрами  $N_1$  и  $d_1$ , окружен переходными слоями, заполненными эффективными средами. Толщины переходных слоев  $d_{01}$  и  $d_{12}$ . Верхний слой заполнялся на  $f_0$  воздухом ( $n_0 = 1$ ), на  $f_1$  диоксидом кремния с  $N_1$  и на  $f_2$  аморфным кремнием ( $N_2 = 4,023 - i0,23$ ,  $\lambda = 632,8$  нм), Переходный слой  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$  заполнялся на  $f_0$  диоксидом кремния с  $N_1$ , на  $f_1$  материалом подложки ( $N_3 = n_3 - ik_3$ ) и на  $f_2$  аморфным кремнием.

Для расчета  $r_p$  и  $r_s$  структуры  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$  в основном уравнении эллипсометрии использовали рекуррентные соотношения, в которых амплитудные коэффициенты отражения каждого следующего слоя выражается через амплитудные коэффициенты отражения предыдущего слоя, начиная с нижнего слоя на подложке [4]. Это позволило по электродинамическим параметрам выбранных моделей структур  $\text{SiO}_2\text{-cSi}$  рассчитать значения теоретических ( $\Delta$  и  $\Psi$ ) эллип-

сометрических углов и сравнивать их значения со значениями соответствующих измеренных углов ( $\Delta_e$  и  $\Psi_e$ ). Другими словами – решить прямые и обратные задачи многоугольной эллипсометрии.

Общий подход к решению обратных задач спектрофотометрии и эллипсометрии обсуждался в работе [5].

## 2. Экспериментальные результаты

Эксперименты выполнены на промышленных пластинах КДБ 12, обработанных в буферном растворе после предварительной шлифовки и полировки. Затем эти пластины подвергались термической обработке ( $800^{\circ}\text{C}$ ) в атмосфере газов  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$  и  $\text{H}_2$  в течение 15 (образец 1) и 90 (образец 2) минут.

На профилометре Talystep (фирма Taylor-Hobson) иглой с радиусом закругления 2 мкм шероховатость обработанных пластин нельзя обнаружить.

Измерения поляризационных углов  $\psi_e(\varphi)$  и  $\Delta_e(\varphi)$  осуществляли на лазерном эллипсометре ЛЭФ 3М-1 ( $\lambda=632,8$  нм) при углах падения  $\varphi$  от  $60^{\circ}$  до  $76^{\circ}$  с шагом  $1^{\circ}$ . В этой области углов падения эллипсометрические параметры наиболее чувствительны к характеристикам подложки КДБ 12 со слоем  $\text{SiO}_2$ .

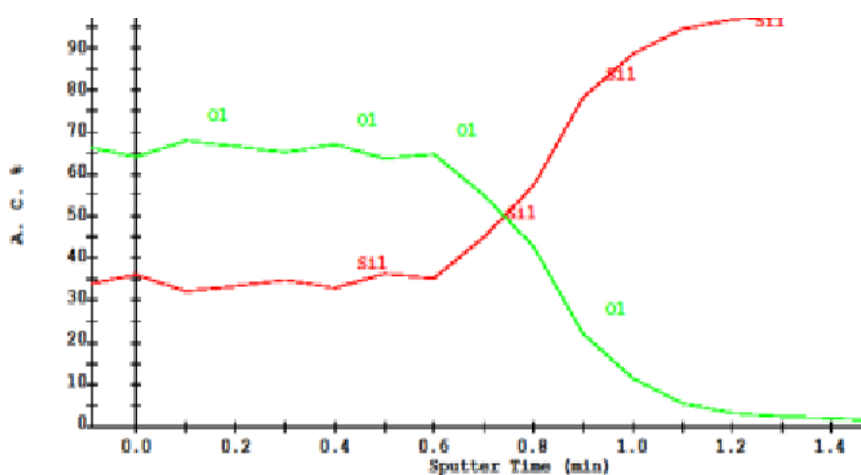


Рисунок 1 – Распределение атомов O и Si по толщине слоя  $\text{SiO}_2$

Для образца 1 на Оже-спектрометре PHI 660 (PerkinElmer) удалось измерить распределение концентраций атомов O и Si по нормали, направленной от поверхности вглубь образовавшихся пленок  $\text{SiO}_2$  (рисунок 1). Его поверхностный слой толщиной 3,4 нм по стехиометрическому составу соответствует оксиду кремния  $\text{SiO}_2$ . Между этим слоем и подложкой находится неоднородный переходной слой ( $d_{12} = 4,4$  нм). При послойном распылении ионами  $\text{Ar}^+$  происходит электризация толстых диэлектрических пленок. Это не позволяет провести подобные измерения для образца 2.

В таблице 1 приведены значения параметров моделей I – III, которые получены при решении обратных задач многоугловой эллипсометрии для двух образцов структуры SiO<sub>2</sub>-cSi.

Таблица 1 – Параметры образцов 1 и 2

Образец 1			
Модель	I	II	III
поверхн. слой		$\alpha_{01} = -0,012$ нм	$d_{01} = 1,7$ нм; $f_0 = 0,43$ ; $f_1 = 0,56$ ; $f_2 = 0,01$
SiO <sub>2</sub>	$N_1 = 1,45 - i0,025$ ; $d_1 = 9,6$ нм	$N_1 = 1,46 - i10^{-4}$ ; $d_1 = 3,9$ нм	$N_1 = 1,453 - i0,03$ $d_1 = 3,9$ нм
переход. слой		$\alpha_{12} = -0,098$ нм	$d_{12} = 5,5$ нм; $f_0 = 0,60$ ; $f_1 = 0,34$ ; $f_2 = 0,06$
подложка	$N_3 = 3,81 - i0,013$	$N_3 = 3,83 - i0,024$	$N_3 = 3,83 - i0,018$
Образец 2			
Модель	I	II	III
поверхн. слой		$\alpha_{01} = -0,81$ нм	$d_{01} = 4,2$ нм; $f_0 = 0,46$ ; $f_1 = 0,52$ ; $f_2 = 0,02$
SiO <sub>2</sub>	$N_1 = 1,46 - i10^{-4}$ ; $d_1 = 932,0$ нм	$N_1 = 1,457 - i10^{-4}$ ; $d_1 = 933,5$ нм	$N_1 = 1,46 - i10^{-4}$ $d_1 = 927,7$ нм
переход. слой		$\alpha_{12} = -0,09$ нм	$d_{12} = 7,7$ нм; $f_0 = 0,49$ ; $f_1 = 0,40$ ; $f_2 = 0,11$
подложка	$N_3 = 3,97 - i0,011$	$N_3 = 3,83 - i0,017$	$N_3 = 3,83 - i0,018$

## Заключение

Приведенные данные показывают, что с увеличением времени обработки пластин увеличивается не только толщина верхнего переходного слоя  $d_{01}$ , но и увеличивается содержание в нем пор ( $f_0$ ) и аморфного кремния ( $f_2$ ). Неоднородности структуры этого слоя могут приводить к небольшим световым потерям, которые частично характеризуется долей поглощающего аморфного кремния.

В переходном слое SiO<sub>2</sub>-cSi с увеличением времени термообработки пластин уменьшается содержание диоксида кремния ( $f_0$ ), увеличивается содержание материала подложки ( $f_1$ ) и аморфного кремния ( $f_2$ ).

## Литература

1. Дусь, А.И. Модель термического окисления кремния на фронте объемной реакции / А.И. Дусь, О.В. Александров // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – № 11. – С. 1400–1406.

2. Roussel, P.H. Numerical aspects of the implementation of effective-medium approximation models in spectroscopic ellipsometry regression software/ P.H. Roussel, J. Vanhellemont, H.E.Maes // Thin Solid Films. – 1993. – Vol. 234. – P. 423–427.

3. Головань, Л.А. Оптические свойства нанокompозитов на основе пористых систем / Л.А. Головань, В.Ю. Тимошенко, П.К. Кашкаров // Успехи физических наук. – 2007. – Т. 177. – № 6. – С. 619–638.

4. Пшеницын, В.И. Эллипсометрия в физико-химических исследованиях / В.И. Пшеницын, М.И. Абаев, Н.Ю. Лызлов. – Москва : Изд-во «Химия», 1986. – 152 с.

5. Исследование наноразмерных слоев на спектрофотометре Photon RT / А.Б. Сотский [и др.] // Материалы Всероссийской научной Интернет-конференции с международным участием «Спектрометрические методы анализа». Казань, 26 сентября 2013 г. – 2013. – С.103–107.